



**Landwirtschaftskammer  
Rheinland-Pfalz**

**Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz**

**Abteilung Weinbau**

**und**

**Wissenschaftlicher Arbeitsausschuss  
FTIR-Kalibrierung für die amtliche Weinuntersuchung**

**Laborvergleichsuntersuchung „Wein 2017“**

**Teil 3**

**Durchführung und Ergebnisse  
der Untersuchung eines Weißweines FT17P04  
und eines Roséweines FT17P05**

Auswertung: Dr. Reinhard Ristow  
Albert-Schweitzer-Str. 6a  
67346 Speyer

Stand: 27.01.2018



## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung</b>	<b>7</b>
2.1	Untersuchungsmaterial	7
2.1.1	Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes	7
2.1.2	Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfmaterialien FT17P04 und FT17P05	7
2.2	Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung	12
<b>3</b>	<b>Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT17P04 und FT17P05</b>	<b>13</b>
3.1	Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter	13
3.2	Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen	16
<b>4</b>	<b>Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT16P04</b>	<b>20</b>
4.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	20
4.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	20
4.1.2	FTIR-Laborergebnisse	21
4.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	22
4.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	22
4.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	24
4.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	24
4.2.2	FTIR-Laborergebnisse	25
4.2.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	26
4.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	26
4.3	Gesamtextrakt [g/L]	28
4.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	28
4.3.2	FTIR-Laborergebnisse	28
4.3.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	29
4.3.4	Angaben zu den Analyseverfahren	30
4.4	Vergärbare Zucker [g/L]	32
4.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	32
4.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	33
4.4.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	36
4.4.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	37
4.4.7	Angaben zu den Analyseverfahren	37
4.5	Glucose [g/L]	41
4.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	41
4.5.2	FTIR-Laborergebnisse	41
4.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	43
4.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	43
4.6	Fructose [g/L]	45
4.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	45
4.6.2	FTIR-Laborergebnisse	45
4.6.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	47
4.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	47

4.7	Glycerin [g/L]	49
4.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	49
4.7.2	FTIR-Laborergebnisse	49
4.7.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	50
4.7.4	Angaben zu den Analyseverfahren	51
4.8	pH-Wert	52
4.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	52
4.8.2	Angaben zu den Analyseverfahren	52
4.8.3	FTIR-Laborergebnisse	53
4.8.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	54
4.9	Gesamtsäure [g/L]	56
4.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	56
4.9.2	FTIR-Laborergebnisse	57
4.9.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	58
4.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	58
4.10	Weinsäure [g/L]	60
4.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	60
4.10.2	FTIR-Laborergebnisse	60
4.10.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	62
4.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	62
4.11	Flüchtige Säure [g/L]	64
4.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	64
4.11.2	FTIR-Laborergebnisse	64
4.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren	66
4.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	66
4.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	68
4.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse	68
4.12.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	68
4.12.3	Angaben zu den Analyseverfahren	69
4.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	70
4.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	70
4.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	70
4.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	70
4.13.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	72
4.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	72
4.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	74
4.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	74
4.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	74
4.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	75
4.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	76
4.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	76
4.15	Reduktone [mg/L]	79
4.15.1	Laborergebnisse	79
4.15.2	Angaben zu den Analyseverfahren	79
4.15.3	Deskriptive Ergebnisse	80
4.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	81
4.16.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	81
4.16.2	Laborergebnisse für Freie Schweflige Säure einschließlich Reduktone	81
4.16.3	Laborergebnisse für Freie Schweflige Säure ausschließlich Reduktone	82
4.16.4	Deskriptive Ergebnisse	83
4.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	83

4.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	85
4.17.1	Laborergebnisse (wie mitgeteilt)	85
4.17.2	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone	86
4.17.3	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone	87
4.17.4	Deskriptive Ergebnisse	87
4.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	87
<b>5</b>	<b>Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT17P05</b>	<b>90</b>
5.1	Relative Dichte 20 °C/20 °C	90
5.1.1	Herkömmliche Laborergebnisse	90
5.1.2	FTIR-Laborergebnisse	91
5.1.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	92
5.1.4	Angaben zu den Analyseverfahren	92
5.2	Vorhandener Alkohol [g/L]	94
5.2.1	Herkömmliche Laborergebnisse	94
5.2.2	FTIR-Laborergebnisse	95
5.2.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	96
5.2.4	Angaben zu den Analyseverfahren	96
5.3	Gesamtextrakt [g/L]	98
5.3.1	Herkömmliche Laborergebnisse	98
5.3.2	Angaben zu den Analyseverfahren	98
5.3.3	FTIR-Laborergebnisse	99
5.3.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	100
5.4	Vergärbare Zucker [g/L]	102
5.4.1	Herkömmliche Laborergebnisse	102
5.4.2	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker	103
5.4.4	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)	104
5.4.5	FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)	106
5.4.6	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	107
5.4.7	Angaben zu den Analyseverfahren	107
5.5	Glucose [g/L]	111
5.5.1	Herkömmliche Laborergebnisse	111
5.5.2	FTIR-Laborergebnisse	111
5.5.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	113
5.5.4	Angaben zu den Analyseverfahren	113
5.6	Fructose [g/L]	115
5.6.1	Herkömmliche Laborergebnisse	115
5.6.2	FTIR-Laborergebnisse	115
5.6.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	117
5.6.4	Angaben zu den Analyseverfahren	117
5.7	Glycerin [g/L]	119
5.7.1	Herkömmliche Laborergebnisse	119
5.7.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	119
5.7.3	Angaben zu den Analyseverfahren	119
5.7.4	FTIR-Laborergebnisse	120
5.8	pH-Wert	122
5.8.1	Herkömmliche Laborergebnisse	122
5.8.2	Angaben zu den Analyseverfahren	122
5.8.3	FTIR-Laborergebnisse	123
5.8.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	124

5.9	Gesamtsäure [g/L]	126
5.9.1	Herkömmliche Laborergebnisse	126
5.9.2	FTIR-Laborergebnisse	127
5.9.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	128
5.9.4	Angaben zu den Analyseverfahren	128
5.10	Weinsäure [g/L]	130
5.10.1	Herkömmliche Laborergebnisse	130
5.10.2	FTIR-Laborergebnisse	130
5.10.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	132
5.10.4	Angaben zu den Analyseverfahren	132
5.11	Flüchtige Säure [g/L]	134
5.11.1	Herkömmliche Laborergebnisse	134
5.11.2	FTIR-Laborergebnisse	134
5.11.3	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren	136
5.11.4	Angaben zu den Analyseverfahren	136
5.12	Acetat (als Essigsäure) [g/L]	138
5.12.1	Herkömmliche Laborergebnisse	138
5.12.2	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	138
5.12.3	Angaben zu den Analyseverfahren	139
5.13	Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]	140
5.13.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	140
5.13.2	Laborergebnisse L-Äpfelsäure	140
5.13.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure	141
5.13.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	142
5.13.5	Angaben zu den Analyseverfahren	142
5.14	Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]	144
5.14.1	Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	144
5.14.2	Laborergebnisse L-Milchsäure	144
5.14.3	FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure	145
5.14.4	Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren	146
5.14.5	Angaben zu den Analyseverfahren	146
5.15	Reduktone [mg/L]	148
5.15.1	Laborergebnisse	148
5.15.2	Angaben zu den Analyseverfahren	148
5.15.3	Deskriptive Ergebnisse	149
5.16	Freie Schweflige Säure [mg/L]	150
5.16.1	Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR	150
5.16.2	Laborergebnisse, jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone	150
5.16.3	Laborergebnisse, jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone	151
5.16.5	Angaben zu den Analyseverfahren	152
5.17	Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	155
5.17.1	Laborergebnisse (wie mitgeteilt)	155
5.17.2	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone	156
5.17.3	Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone	157
5.17.4	Deskriptive Ergebnisse	158
5.17.5	Angaben zu den Analyseverfahren	158

## **1 Einleitung**

Die jährliche Laborvergleichsuntersuchung der Landwirtschaftskammer Rheinland-Pfalz wurde wiederum in Kooperation mit dem "Wissenschaftlichen Arbeitsausschuss FTIR-Kalibrierung in der amtlichen Weinanalytik" mit einer speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung verbunden. In dieser erweiterten Laborvergleichsuntersuchung waren von den beteiligten Laboratorien im Rahmen ihrer Möglichkeiten mit herkömmlichen Methoden Parameter zu bestimmen, die über den Umfang der amtlichen Qualitätsweinanalyse hinausgehen, aber üblicherweise mit Hilfe des Verfahrens der Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie im mittleren Infrarot (FTIR) bestimmt werden. Neben einem Deutschen Perlwein, der allen teilnehmenden Laboratorien zur Verfügung stand, waren von den Teilnehmern an der speziellen FTIR-Laborvergleichsuntersuchung ein Weißwein, zwei Rotweine und ein Roséwein sowohl mit den herkömmlichen Verfahren als auch mittels FTIR zu untersuchen.

Der vorliegende Teil 3 dokumentiert die Ergebnisse an den Prüfmaterialien FT17P04 und FT17P05, nachdem in Teil 1 die für alle Prüfmaterialien gemeinsamen Aspekte und die Ergebnisse für das Prüfmaterial FT17P01 sowie in Teil 2 die Ergebnisse für die Prüfmaterialien FT17P02 und FT17P03 behandelt wurden. Die Ausführungen beschränken sich dabei auf Gesichtspunkte und Sachverhalte, die nicht bereits in Teil 1 oder Teil 2 der Berichte behandelt wurden. Daher wird bei Bedarf auf diese Teile verwiesen.

## **2 Durchführung der Laborvergleichsuntersuchung**

Im Folgenden werden die spezifischen Informationen zur Auswahl bzw. Herstellung der Prüfmaterialien FT17P04 und FT17P05 und die Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für diese Prüfmaterialien dargestellt.

### **2.1 Untersuchungsmaterial**

#### **2.1.1 Herstellung und Auswahl des Untersuchungsgutes**

Als Prüfgut FT17P04 wurde aus Württemberg ein süßer Rotwein der Rebsorte Samtrot aus dem Jahrgang 2015 in einer Menge von 240 Flaschen a 0,25 L in 20 Kartons a 12 Flaschen bezogen und unverändert als Prüfgut eingesetzt.

Als Vertreter ausländischer Weine wurde ein aus Spanien stammender halbtrockener Rosé ohne Jahrgang wiederum in einer Menge von 240 Flaschen a 0,25 L in 20 Kartons a 12 Flaschen bezogen und unverändert als Prüfgut FT17P05 eingesetzt.

Eine Prüfung auf Homogenität wurde für beide Prüfgüter durchgeführt.

#### **2.1.2 Ergebnisse der Homogenitätsprüfung der Prüfmaterialien FT17P04 und FT17P05**

Zur Homogenitätsprüfung wurden aus den jeweils 20 nummerierten Kartons jeweils 12 ausgelost und je eine Flasche entnommen. Die Ziehung der Proben und Festlegung der Messreihen-

folgen erfolgten für beide Prüfgüter wie für das Prüfgut FT17P02 beschrieben. Die Serien von jeweils zwei Messproben für die Untersuchungen unter Wiederholbedingungen wurden für das Prüfgut FT17P04, wie für das Prüfgut FT17P03 beschrieben, gebildet und untersucht. Die Messergebnisse sind in der Tabelle 1 und der Tabelle 2 dokumentiert.

**Tabelle 1: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT17P04**

Lfd. Nr.	Probe-Nr	pH-Wert	Gesamtsäure g/L		Reduktone mg/L		Schweflige Säure mg/L		
			roh	korr.	roh	korr.	Frei	Gebunden	Gesamt
1	1	3,43	5,80	5,81	51,15	57,50	73,44	104,17	177,61
2	2	3,41	5,85	5,87	49,90	57,37	68,23	100,00	168,23
3	5	3,36	5,96	5,99	49,27	57,87	68,23	102,08	170,31
4	3	3,41	5,94	5,97	47,92	57,65	70,83	102,08	172,91
5	11	3,39	5,77	5,81	46,25	57,10	69,79	102,08	171,87
6	12	3,38	5,76	5,81	45,73	57,71	63,54	106,25	169,79
7	20	3,40	5,86	5,92	56,15	58,13	70,31	102,08	172,39
8	16	3,42	5,88	5,95	54,79	58,76	69,27	104,17	173,44
9	18	3,40	5,88	5,96	51,67	57,62	69,79	103,13	172,92
10	7	3,43	5,86	5,95	49,17	57,11	69,27	101,04	170,31
11	8	3,43	5,82	5,92	47,40	57,32	69,79	102,08	171,87
12	15	3,42	5,78	5,88	47,19	59,10	69,27	102,08	171,35
13	7	3,41	5,76	5,87	56,15	57,75	69,27	100,00	169,27
14	16	3,41	5,77	5,89	54,17	57,37	69,79	98,96	168,75
15	15	3,41	5,73	5,86	49,38	54,19	68,75	100,00	168,75
16	1	3,43	5,71	5,85	50,52	56,93	69,27	102,08	171,35
17	18	3,43	5,75	5,90	49,17	57,18	70,31	102,08	172,39
18	5	3,43	5,74	5,90	47,71	57,32	69,27	102,08	171,35
19	8	3,42	5,76	5,93	56,56	58,29	69,79	102,08	171,87
20	2	3,43	5,75	5,92	53,33	56,79	68,23	102,08	170,31
21	3	3,44	5,65	5,83	51,15	56,34	68,23	104,17	172,40
22	11	3,44	5,72	5,91	49,90	56,82	70,31	103,13	173,44
23	12				48,65	57,31	69,27	101,04	170,31
24	20	3,43	5,69	5,90	47,50	57,89	69,27	101,04	170,31

Die Messergebnisse beider Tabellen wurden wie in Teil 1 beschrieben zunächst graphisch auf Auffälligkeiten geprüft. Bei einzelnen auffälligen Messergebnissen ordnete sich der Wiederholungswert unauffällig in die Gesamtschar der Messergebnisse ein. Mit Ausnahme der Messwerte für Gesamtsäure und Reduktone ergaben die weiteren Prüfungen auf eine Korrelation zur Messreihenfolge bzw. Probennummer nur vereinzelt wenig ausgeprägte, schwach signifikante Korrelationen zum Messverlauf. Die nachfolgenden varianzanalytischen Prüfungen zeigen, dass sich diese Abweichungen nicht nachteilig auf die Homogenitätsprüfung auswirkten. Bei den Parametern Gesamtsäure und Reduktone ergaben sich jedoch Werte des Quotienten  $s_r/s_z$  über 0,5, die eine unzureichende Wiederholbarkeit der Messungen anzeigen. Daher wurde die systematische Abhängigkeit der Werte vom Messverlauf korrigiert. Während dies für den Parameter Gesamtsäure in einem Schritt möglich war, wurde bei den in vier Teilgruppen von je 6 Messungen erhaltenen Werten für die Reduktone eine starke negative Korrelation innerhalb der Messgruppen und außerdem eine systematische Abweichung der Ergebnisse der ersten Messgruppe gegenüber den anderen Messgruppen beobachtet. Die Korrektur der Korrelation wurde daher getrennt für jede Messgruppe durchgeführt und zusätzlich die systematische Abweichung der ersten Messgruppe korrigiert. Die korrigierten Messwerte sind in der Tabelle 2 für die Parameter Gesamtsäure und Reduktone jeweils in der Unterspalte "korr." aufgeführt und die varianzanalytische Prüfung für die korrigierten Werte wiederholt.



Tabelle 2: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT17P04, Teil 2 Messergebnisse mit FTIR

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Dichte	Vorh. Alkohol	Gesamt-extrakt	Vergärb. Zucker	Glucose	Fructose	Glycerin	pH-Wert	Gesamt-säure	Wein-säure	Äpfel-säure	Milch-säure	Flüchtige Säure
		g/L	g/L	g/L	g/L	g/L	g/L	g/L		g/L	g/L	g/L	g/L	g/L
1	1	1,01515	75,01	71,89	51,20	8,45	40,67	5,31	3,42	5,38	2,75	2,18	0,20	0,808
2	2	1,01513	75,16	71,88	51,18	8,59	40,56	5,34	3,41	5,39	2,78	2,10	0,18	0,797
3	5	1,01513	75,16	71,81	51,09	8,41	40,63	5,33	3,41	5,38	2,80	2,14	0,17	0,803
4	3	1,01522	75,15	72,04	51,38	8,51	40,83	5,39	3,41	5,40	2,82	2,09	0,20	0,801
5	11	1,01516	75,15	71,90	51,29	8,41	40,73	5,34	3,41	5,38	2,78	2,12	0,17	0,800
6	12	1,01514	75,19	71,82	51,41	8,61	40,60	5,21	3,41	5,39	2,76	2,12	0,19	0,792
7	20	1,01521	75,25	71,95	51,29	8,49	40,71	5,42	3,41	5,39	2,77	2,13	0,19	0,790
8	16	1,01516	75,20	71,86	51,22	8,53	40,64	5,29	3,41	5,39	2,74	2,14	0,18	0,799
9	18	1,01516	75,18	71,84	51,27	8,47	40,51	5,22	3,41	5,40	2,72	2,12	0,21	0,803
10	7	1,01519	75,32	71,93	51,37	8,44	40,68	5,34	3,41	5,40	2,75	2,12	0,17	0,800
11	8	1,01516	75,34	71,91	51,22	8,41	40,62	5,40	3,41	5,41	2,78	2,14	0,20	0,806
12	15	1,01519	75,17	71,91	51,25	8,38	40,66	5,38	3,41	5,39	2,72	2,16	0,19	0,809
13	7	1,01511	75,22	71,82	51,20	8,36	40,50	5,24	3,41	5,41	2,74	2,15	0,19	0,792
14	16	1,01515	75,31	71,85	51,25	8,40	40,58	5,39	3,41	5,38	2,75	2,10	0,21	0,808
15	15	1,01514	75,12	71,85	51,18	8,47	40,62	5,31	3,41	5,40	2,75	2,13	0,18	0,803
16	1	1,01522	75,23	71,98	51,44	8,41	40,66	5,25	3,41	5,39	2,73	2,14	0,22	0,807
17	18	1,01508	74,77	71,73	51,21	8,58	40,56	5,35	3,42	5,37	2,76	2,12	0,17	0,804
18	5	1,01512	74,92	71,78	51,14	8,51	40,50	5,35	3,42	5,37	2,76	2,10	0,22	0,812
19	8	1,01518	75,08	71,94	51,26	8,55	40,68	5,33	3,42	5,38	2,72	2,17	0,21	0,795
20	2	1,01515	74,86	71,86	51,14	8,57	40,57	5,25	3,43	5,38	2,72	2,16	0,20	0,797
21	3	1,01515	75,03	71,97	51,32	8,52	40,67	5,27	3,43	5,37	2,72	2,16	0,22	0,814
22	11	1,01513	75,09	71,80	51,25	8,45	40,65	5,27	3,42	5,37	2,73	2,17	0,22	0,801
23	12	1,01516	74,97	71,89	51,20	8,51	40,64	5,30	3,42	5,39	2,78	2,11	0,24	0,803
24	20	1,01516	75,03	71,95	51,04	8,41	40,60	5,36	3,42	5,38	2,73	2,12	0,22	0,808

Die Ergebnisse der varianzanalytischen Prüfungen sind in der Tabelle 3 zusammengefasst.

**Tabelle 3: Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT17P04**

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für $s_{Pr}$
					Fehler ( $s_i$ )	Proben ( $s_{Pr}$ )	Ziel ( $s_z$ )	$s_i/s_z$	$s_{Pr}/s_z$	
Rel. Dichte FTIR	1,015156	24	0,8036	0,6379	0,000035		0,000132	0,267		0,000062
Vorh. Alkohol FTIR	75,12	24	0,7019	0,7174	0,154		0,535	0,288		0,2579
Gesamtextrakt FTIR	71,88	24	3,3154	<b>0,0252</b>	0,049	0,053	0,594	0,083	0,089	0,2426
Vergärbare Zucker FTIR	51,24	24	1,1025	0,4323	0,094	0,021	1,426	0,066	0,015	0,5789
Glucose FTIR	8,48	24	1,6606	0,1982	0,062	0,036	0,272	0,229	0,132	0,1234
Fructose FTIR	40,63	24	1,6337	0,2058	0,067	0,037	1,140	0,058	0,033	0,4615
Glycerin FTIR	5,32	24	0,8366	0,6127	0,061		0,234	0,261		0,1096
pH-Wert	3,41	24	0,3576	0,9505	0,008		0,048	0,166		0,0205
Gesamtsäure FTIR	5,39	24	0,9636	0,5210	0,012		0,107	0,113		0,0444
Weinsäure FTIR	2,75	24	0,3512	0,9533	0,033		0,134	0,248		0,0618
Äpfelsäure FTIR	2,13	24	0,5771	0,8143	0,028		0,072	0,387		0,0388
Milchsäure FTIR	0,198	24	0,4545	0,8989	0,023		0,014	<b>1,610</b>		0,0221
Flüchtige Säure FTIR	0,802	24	0,8975	0,5677	0,006		0,047	0,138		0,0197
pH-Wert, potentiometr.	3,42	23	0,5295	0,8467	0,023		0,0476	0,474		0,0283
Gesamtsäure, acidimetr.	5,79	23	0,1958	0,9941	0,102		0,107	<b>0,950</b>		0,1035
- korrigiert	5,90	23	1,0301	0,4808	0,051	0,006	0,107	0,472	0,059	0,0635
Reduktone	50,4	24	0,8620	0,5937	3,328		4,47	<b>0,744</b>		3,5679
- korr. o. Lfd.Nr. 15	57,5	23	1,7230	0,1902	0,540	0,332	5,00	0,108	0,066	2,0684
Freie SO <sub>2</sub>	69,3	24	1,1481	0,4061	1,584	0,431	5,86	0,270	0,074	2,7716
Gebundene SO <sub>2</sub>	102,1	24	0,5920	0,8030	1,780		8,14	0,219		3,6593
Gesamte SO <sub>2</sub>	171,4	24	1,3631	0,3007	1,849	0,788	5,36	0,345	0,147	2,7486

N = Anzahl der Messwerte

Die Varianzanalysen zeigen nur für den Parameter Gesamtextrakt ein schwach signifikantes Ergebnis. Für deren Aussagekraft ist der Quotient  $s_i/s_{Ziel}$  maßgeblich. Er überschreitet den höchstzulässigen Wert 0,5 nur für den Parameter Milchsäure sowie für die unkorrigierten Messergebnisse für Gesamtsäure (acidimetrisch) und Reduktone. Die FTIR-Messergebnisse für Milchsäure liegen unter der Bestimmungsgrenze des Verfahrens und tragen somit zur Entscheidung über die ausreichende Homogenität nicht bei. Für alle anderen geprüften Parameter sind die Ergebnisse der Varianzanalyse aussagekräftig und belegen – mit Ausnahme des Parameters Gesamtextrakt – ohne weitere Prüfungen eine ausreichende Homogenität. Die weiteren Prüfungen anhand des Quotienten aus der Standardabweichung zwischen den Proben  $s_{Pr}$  und der Zielstandardabweichung ( $s_{Ziel}$ ), der einen Betrag von 0,3 nicht überschreiten soll, sowie der Vergleich von  $s_{Pr}$  mit dem nach Fearn und Thompson berechneten höchstzulässigen Betrag für diese Standardabweichung ergibt, dass auch für den Parameter Gesamtextrakt eine ausreichende Homogenität vorliegt, da weder der zulässige Höchstwert des Quotienten  $s_{Pr}/s_{Ziel}$  noch der Maximalwert für  $s_{Pr}$  überschritten werden. Insgesamt ergibt sich für das **Prüfgut FT17P04** eine **ausreichende Homogenität** für die Laborvergleichsuntersuchung.

Die Homogenitätsprüfung des Prüfgutes **FT17P05** geschah mit der Ziehung der Proben, der Serien von Doppelproben und der angewandten Messverfahren wie für das Prüfgut FT17P02 beschrieben. Die Messergebnisse sind in der Tabelle 4 zusammengestellt.

Die graphische Prüfung der Messergebnisse erfolgte wie bei den anderen Prüfgütern. Sie zeigte keine Besonderheiten, d.h. zu erkennbar abweichenden Messergebnissen lag der zweite Messwert im Hauptfeld der Streuungen. Korrelationen zur Messfolge waren nur bei den mit HPLC bestimmten Werten zu beobachten. Der Erfahrung entsprechend war diese nur bei dem Parameter Ethanol so ausgeprägt, dass von vornherein eine Korrektur durchgeführt wurde.

**Tabelle 4: Messergebnisse zur Homogenitätsprüfung des Prüfgutes FT17P05**

Lfd. Nr.	Probe-Nr.	Relative Dichte	Vorhand. Alkohol	Ethanol HPLC	Ethanol korr.	Gesamt-extrakt	Glucose	Fructose	Zucker nach Inv.	Glycerin	pH-Wert	Ges. Säure	Reduktone	Freie SO2	Gesamte SO2
1	14	0,99732	90,08	92,38	92,47	32,2	7,21	7,82	15,00	5,05	3,20	4,62	24,7	39,6	124,0
2	19	0,99731	89,92	92,20	92,38	32,1	7,07	7,75	14,80	5,00	3,20	4,63	23,4	35,9	119,7
3	6	0,99731	89,92	92,43	92,70	32,1	7,09	7,73	14,80	5,04	3,22	4,63	23,8	38,5	125,1
4	16	0,99732	89,84	92,07	92,43	32,1	6,94	7,61	14,50	4,94	3,22	4,62	24,0	38,5	124,4
5	10	0,99733	89,68	92,34	92,79	32,1	7,06	7,70	14,80	5,00	3,22	4,61	23,4	37,0	123,3
6	8	0,99734	89,76	92,01	92,55	32,1	6,94	7,61	14,50	4,95	3,22	4,61	24,3	38,5	125,1
7	11	0,99738	89,76	92,16	92,79	32,2	7,05	7,73	14,80	5,05	3,22	4,61	24,3	38,5	122,8
8	12	0,99733	89,68	92,09	92,81	32,1	7,02	7,67	14,70	4,99	3,21	4,61	23,3	37,0	124,1
9	13	0,99734	89,84	92,22	93,03	32,2	7,09	7,71	14,80	5,02	3,22	4,60	24,5	40,1	127,0
10	4	0,99734	89,76	92,00	92,91	32,2	7,06	7,71	14,80	5,01	3,21	4,61	25,0	41,7	128,9
11	15	0,99735	89,92	91,77	92,77	32,2	7,04	7,70	14,70	5,02	3,22	4,61	24,3	38,5	125,1
12	17	0,99735	89,68	91,93	93,02	32,2	7,05	7,70	14,80	5,00	3,22	4,64	25,0	40,1	127,0
13	12	0,99733	89,84	91,31	92,49	32,1	7,09	7,71	14,80	4,97	3,21	4,63	23,8	37,0	124,8
14	4	0,99731	89,84	91,28	92,55	32,1	6,97	7,61	14,60	4,94	3,22	4,64	26,0	40,6	129,2
15	15	0,99733	89,92	91,30	92,66	32,2	6,97	7,63	14,60	4,92	3,22	4,64	24,8	39,6	126,4
16	10	0,99733	89,52	91,02	92,47	32,0	6,93	7,59	14,50	4,91	3,22	4,60	24,0	38,0	122,2
17	14	0,99736	89,68	90,92	92,46	32,2	6,94	7,59	14,50	4,90	3,22	4,61	24,5	39,6	127,2
18	8	0,99736	89,60	91,02	92,65	32,1	6,95	7,60	14,50	4,92	3,22	4,63	24,5	39,6	124,8
19	11	0,99733	89,76	90,78	92,50	32,1	6,97	7,62	14,60	4,94	3,23	4,64	24,2	39,1	125,0
20	6	0,99734	90,00	90,70	92,51	32,2	6,90	7,57	14,50	4,90	3,22	4,61	24,5	38,0	123,8
21	13	0,99734	89,76	90,83	92,73	32,2	6,91	7,57	14,50	4,94	3,23	4,64	25,0	40,6	127,7
22	19	0,99733	89,76	90,76	92,75	32,1	6,98	7,63	14,60	4,99	3,21	4,61	22,9	36,5	121,9
23	17	0,99734	89,68	90,74	92,82	32,1	6,91	7,54	14,50	4,91	3,22	4,64	24,5	40,1	127,0
24	16	0,99735	89,60	90,33	92,50	32,1	6,93	7,54	14,50	4,91	3,22	4,62	24,0	38,5	122,8

Die Ergebnisse der anschließenden Varianzanalyse zeigt Tabelle 5.

**Tabelle 5: Ergebnisse der Homogenitätsprüfung für das Prüfgut FT17P05**

	Mittelwert	N	F	p	Standardabweichungen			Quotienten		Maximal tolerierter Wert für $s_{Pr}$
					Fehler ( $s_r$ )	Proben ( $s_{Pr}$ )	Ziel ( $s_z$ )	$s_r/s_z$	$s_{Pr}/s_z$	
Rel. Dichte, dens.	0,997336	24	0,6768	0,7372	0,000018		0,000132	0,139		0,0001
Vorh. Alkohol (NIR)	89,783	24	1,5832	0,2208	0,119	0,064	0,535	0,222	0,120	0,2413
Ethanol korr.	92,656	24	1,2435	0,3556	0,177	0,062	0,535	0,332	0,116	0,2704
Gesamtextrakt	32,138	24	2,2364	0,0912	0,046	0,036	0,594	0,077	0,060	0,2420
Glucose	7,003	24	0,3570	0,9508	0,094		0,232	0,404		0,1273
Fructose	7,652	24	0,3755	0,9423	0,088		0,249	0,351		0,1288
Zucker nach Inv.	14,654	24	0,4206	0,9189	0,177		0,439	0,403		0,2404
Glycerin	4,968	24	0,2379	0,9881	0,063		0,221	0,283		0,1059
pH-Wert	3,218	24	2,3182	0,0821	0,006	0,005	0,0476	0,121	0,098	0,0198
Gesamtsäure	4,621	24	0,5052	0,8659	0,016		0,107	0,149		0,0454
Reduktone	24,279	24	5,9672	0,0023	0,365	0,575	2,40	0,152	0,239	1,0218
Freie SO <sub>2</sub>	38,796	24	16,7551	0,0000	0,494	1,386	3,58	0,138	0,387	1,5071
Gesamte SO <sub>2</sub>	124,971	24	8,2415	0,0005	1,085	2,064	5,36	0,202	0,385	2,3727

Diese Ergebnisse zeigen, dass die beobachteten Abweichungen bei Einzelwerten und die Korrelationen zur Messfolge die Wiederholbarkeit der Messungen nicht beeinträchtigten bzw. im Falle der mittels HPLC bestimmten Ethanolwerte erfolgreich korrigiert wurden. Für alle Parameter liegt der Wert des Quotienten  $s_r/s_{Ziel}$  unter 0,5. Die Aussagekraft der Varianzanalyse ist damit gegeben. Sie zeigt nur für die Parameter der Analytik der Schwefligen Säure ein signifikantes, d.h. eine Inhomogenität anzeigendes Ergebnis. Dies ist nicht überraschend. Wie die Prüfgüter FT17P02 und FT17P03 wurde auch das Prüfgut FT17P05 längere Zeit nach der Füllung vom Lager entnommen. Für die Parameter Freie und Gesamte Schweflige Säure übersteigt der im nächsten Schritt zu prüfende Wert des Quotienten  $s_{Pr}/s_{Ziel}$  ebenfalls den zulässigen Höchstwert von 0,3. Der Vergleich der Standardabweichung der Proben ( $s_{Pr}$ ) mit dem nach Fearn und Thompson maximal tolerierbaren Wert ergibt jedoch auch für diese Parameter, dass dieser Höchstwert nicht überschritten wird. Damit ist das Prüfgut **FT17P05 ausreichend homogen** und für die Verwendung in der Laborvergleichsuntersuchung geeignet.

## 2.2 Hinweise auf Informationen zur Durchführung und Ergebnisauswertung

Die Informationen zur Verteilung des Untersuchungsmaterials an die Laboratorien, die zur Bearbeitung gegebenen Erläuterungen hinsichtlich der Durchführung der Untersuchungen, Ergebnisübermittlung und Ergebnisbehandlung können Teil 1 des Berichtes, speziell für die Behandlung der FTIR-Messwerte geltende Ergänzungen dem Abschnitt 2.2 in Teil 2 des Berichtes entnommen werden. Hinsichtlich der Verfahrensweise bei der Ergebnisauswertung, insbesondere hinsichtlich der Grundlagen für die Bewertung der FTIR-Untersuchungsergebnisse unter Anwendung Matrixeffekte berücksichtigender Zielstandardabweichungen wird auf Abschnitt 2.4 in Teil 1 der Berichte verwiesen.

### 3 Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung an den Prüfgütern FT17P04 und FT17P05

#### 3.1 Herkömmliche Methoden mit Diskussion einzelner Parameter

Das Gesamtergebnis der Laborvergleichsuntersuchung für das Prüfgut FT17P04 wird durch die in Tabelle 6 und für das Prüfgut FT17P05 durch die in Tabelle 7 zusammengestellten deskriptiv-statistischen Ergebnisse für die geprüften Parameter beschrieben. Hinsichtlich der über die Legende hinausgehenden Erläuterungen zu den Tabellen und der prinzipiellen Interpretation der Daten wird auf Teil 1 der Berichte verwiesen.

Nach den Daten in Tabelle 6 fanden sich unter den Laborergebnissen der herkömmlichen Methoden für das Prüfgut **FT17P04** bei den 26 Parameterdatengruppen nur vereinzelt Laborergebnisse, die um mehr als 50 % vom Median abwichen. Trifft dies nur für ein Laborergebnis zu, zeigt die Erfahrung, dass häufig Übertragungsfehler vorliegen dürften, z.B. Mitteilung des Wertes für Zuckerfreien Extrakt als Gesamtextrakt oder Vertauschung der Ergebnisse für Freie und Gesamte Schweflige Säure. Analytische Probleme sind hingegen typischerweise Ursache einer Häufung derartiger Laborergebnisse, so z.B. in der Regel bei dem Parameter Reduktone. In diesem Fall nimmt die Häufigkeit von Ausreißern bei höheren Gehalten, wie z.B. bei dem vorliegenden Prüfgut mit nur zwei Ausreißern merklich ab.

Wegen eines Z-Score im absoluten Betrag über 5 wurden bei sieben Datengruppen bis zu zwei Laborergebnisse ausgeschlossen. Drei Laborergebnisse wurden aus diesem Grund bei dem Parameter Gesamtsäure und vier bis fünf bei den verschiedenen Varianten der Bestimmung der Gesamten Schwefligen Säure ausgeschlossen. Die höchstzulässige Ausschlussquote von 22 % wurde nicht erreicht. Der Quotient aus der Standardabweichung der Laborergebnisse und der maßgeblichen Zielstandardabweichung ( $s_L/s_{Ziel}$ ) lag bei 12 der 26 Datengruppen unter 1,5 und damit im voll befriedigenden Bereich. Für ebenfalls 12 aus der Tabelle 6 ersichtlichen Parameterdatengruppen lag der Wert dieses Quotienten über 1,5 bis 2,0 und war damit mäßig erhöht. Bei den Parametern Weinsäure, Acetat, Gesamte Milchsäure und Freie Schweflige Säure (Verfahren ohne Reduktoneinfluss) ist damit bereits eine eingeschränkte Zuverlässigkeit des Bezugswertes verbunden, d.h. der Quotient  $u_M/s_{Ziel}$  ist auf eine Stelle gerundet größer als 0,3. Der Höchstwert 2,0 des Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  wurde nur bei den Laborergebnissen für **jodometrisch bestimmte Gesamte Schweflige Säure** überschritten. Für diese Auswertungsvarianten können aus diesem Grund **keine gültigen Z-Score** ermittelt werden. Sie sind in den Abschnitten 4.16.2 und 4.16.3 daher in grauer Schrift dargestellt. In diesen Fällen wie auch für **reduktometrisch bestimmte Vergärbare Zucker** und für **Gesamte Äpfelsäure** ist keine ausreichende Zuverlässigkeit des Bezugswertes gegeben, weil der Wert des Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  über 0,5 liegt. Erhöhte Werte des Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  sind bei der Bewertung der Z-Score zu Gunsten der, Labors zu beachten soweit die Z-Score auf dieser Grundlage ermittelt wurden. Im Übrigen werden die Ergebnisse aller Parameter mit unbefriedigendem Gesamtergebnis alle Prüfgüter übergreifend im Abschnitt 4 des ersten Teiles der Berichte diskutiert, worauf hier verwiesen wird. Für die hier **nicht genannten Parameter** wurden **gültige Z-Score** erhalten.

**Tabelle 6: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Rotweinprüfgut FT17P04**

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. $s_L$	Zielstdabw n. Horwitz	Zielstdabw exp. herk.	Zielstdabw exp. FTIR	Quotienten				
						$s_H$	$s_{exp}$	$s_{\bar{U}}$	$s_L/s_H$	$s_L/s_{exp}$	$s_L/s_{\bar{U}}$	$u_M/s_{Ziel}$	$u_M/s_{\bar{U}}$
Relative Dichte 20 °C/20 °C	50	49	1,01540	1,01540	0,000155		0,000132	0,000190		1,17	0,81	0,17	0,23
Vorhandener Alkohol (g/L)	23	23	73,941	73,900	0,603	2,188	0,535	0,886	0,28	1,13	0,68	0,23	0,14
Gesamtextrakt (g/L)	36 (2)	36	72,896	72,800	0,365	2,160	0,594	0,594	0,17	0,61	0,61	0,10	0,10
Vergärbare Zucker (g/L)													
- enzymatisch +HPLC	33	32	50,260	49,750	1,401	1,563	1,386	1,386	0,90	1,01	1,01	0,18	0,18
- reduktometrisch	10	10	49,449	49,425	2,432	1,554	1,377	1,377	1,56	1,77	1,77	0,56	0,56
Glucose (g/L)	38 (1)	38	9,524	9,495	0,297	0,383	0,299	0,408	0,78	0,99	0,73	0,16	0,12
Fructose (g/L)	37 (1)	37	40,543	40,400	1,758	1,310	1,134	1,134	1,34	1,55	1,55	0,25	0,25
Glycerin (g/L)	24	24	5,600	5,585	0,244	0,244		0,348	1,00		0,70	0,20	0,20
pH-Wert	43 (1)	41	3,435	3,450	0,0568		0,0476	0,049		1,19	1,15	0,19	0,18
Gesamtsäure (g/L)	47	44	5,380	5,350	0,164	0,235	0,107	0,145	0,70	1,53	1,13	0,23	0,17
Weinsäure (g/L)													
- nur HPLC + IC	10 (1)	10	2,194	2,156	0,158	0,109		0,227	1,45		0,70	0,46	0,22
- alle herk. Verfahren	23 (2)	22	2,165	2,166	0,182	0,109		0,227	1,67		0,80	0,36	0,02
Flüchtige Säure (g/L)	21	21	0,2865	0,2800	0,0416	0,0192	0,0286	0,0891	2,17	1,45	0,47	0,32	0,10
Acetat als Essigsäure (g/L)	21 (1)	21	0,2070	0,2090	0,0302	0,0150			2,02			0,44	
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	11	10	2,188	2,163	0,127	0,1089	0,0728	0,218	1,16	1,74	1,31	0,55	0,40
L-Äpfelsäure (g/L)	26	25	2,191	2,190	0,119	0,1101	0,0735		1,08	1,62		0,32	
Gesamte Milchsäure (g/L)	15	14	0,6646	0,6800	0,0653	0,0408		0,209	1,60		0,45	0,43	0,12
L-Milchsäure (g/L)	23 (1)	23	0,5327	0,5340	0,0563	0,0332	0,0414		1,69	1,36		0,28	
Reduktone (mg/L)	42 (2)	42	47,26	48,00	8,16	4,29			1,90			0,29	
Freie Schweflige Säure (mg/L)													
- Destillation + Photometrie	15	15	27,77	27,40	4,26	2,66			1,60			0,41	
- wie vorstehend + FTIR	32	32	30,65	31,43	5,92	2,99			1,98			0,35	
- jodometr. incl. Reduktone	39	39	71,44	71,61	5,26	6,02			0,87			0,14	
- jodometr. excl. Reduktone	40	40	25,33	22,50	9,64	2,25	6,02		4,28	1,60		0,25	
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)													
- Destillationsverfahren	33	29	120,34	121,00	7,39	9,41	5,36		0,79	1,38		0,26	
- jodometr. incl. Reduktone	24	19	163,67	162,00	11,46	12,05	5,36		0,95	2,14		0,49	
- jodometr. excl. Reduktone	25	21	110,67	109,00	14,78	8,61	5,36		1,72	2,76		0,60	

**Erläuterungen zur Tabelle 6 und zur Tabelle 7:****Labor-Stdabw. ( $s_L$ )** = Standardabweichung der Ergebniswerte zwischen den Laboratorien**Zielstdabw. n. Horwitz ( $s_H$ )** = Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz**Zielstdabw. exp. herk. ( $s_{exp}$ )** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten für herkömmliche Methoden (in der Regel OIV-Methoden)**Zielstdabw. exp. FTIR ( $s_{\bar{U}}$ )** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens**Quotient ( $s_L/s_H$ )** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung n. Horwitz**Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )** = Quotient der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten

**Tabelle 7: Deskriptiv-statistische Kennzahlen der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden für das Roséweinprüfgut FT17P05**

Parameter	Alle Werte	Gültige Werte	Mittelwert	Medianwert	Labor-Stdabw. S <sub>L</sub>	Zielstdabw		Zielstdabw exp. herk. S <sub>exp</sub>	Zielstdabw exp. FTIR S <sub>Ü</sub>	S <sub>L</sub> /S <sub>H</sub>	S <sub>L</sub> /S <sub>exp</sub>	Quotienten		
						n. Horwitz S <sub>H</sub>	S <sub>H</sub>					S <sub>L</sub> /S <sub>Ü</sub>	u <sub>M</sub> /S <sub>Ziel</sub>	u <sub>M</sub> /S <sub>Ü</sub>
Relative Dichte 20 °C/20 °C	54	54	0,99731	0,99730	0,000124			0,000132	0,000190		0,94	0,65	0,13	0,09
Vorhandener Alkohol (g/L)	24	23	89,186	89,200	0,706	2,567	0,535	0,886	0,27	1,32	0,80	0,28	0,17	
Gesamtextrakt (g/L)	43	43	31,776	31,800	0,458	1,069	0,594	0,594	0,43	0,77	0,77	0,12	0,12	
Vergärbare Zucker (g/L)	34	34	13,997	13,990	0,380	0,532	0,421	0,584	0,71	0,90	0,65	0,15	0,11	
- enzymatisch + HPLC														
- reduktometrisch	14	14	13,979	13,900	0,735	0,529	0,418	0,584	1,39	1,76	1,26	0,47	0,34	
Glucose (g/L)	37	37	6,816	6,814	0,163	0,289	0,227	0,408	0,56	0,72	0,40	0,12	0,07	
Fructose (g/L)	37	37	7,163	7,129	0,259	0,300	0,235	0,330	0,86	1,10	0,78	0,18	0,13	
Glycerin (g/L)	22	22	4,943	4,925	0,208	0,219		0,348	0,95		0,60	0,20	0,13	
pH-Wert	46	45	3,312	3,315	0,0626		0,0476	0,0493		1,32	1,27	0,20	0,19	
Gesamtsäure (g/L)	51	51	4,661	4,600	0,170	0,207	0,107	0,145	0,82	1,58	1,17	0,22	0,16	
Weinsäure (g/L)														
- alle Verfahren	12	12	2,248	2,255	0,0837	0,113		0,227	0,74		0,37	0,21	0,20	
- nur HPLC + IC	28	28	2,313	2,300	0,122	0,115		0,227	1,06		0,54	0,20	0,10	
Flüchtige Säure (g/L)	19 (2)	19	0,2679	0,2780	0,0638	0,0191	0,0286	0,0891	3,35	2,23	0,72	0,51	0,16	
Acetat als Essigsäure (g/L)	21 (2)	21	0,1643	0,1700	0,0284	0,0126			2,26			0,49		
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	13	13	1,331	1,300	0,0930	0,0707	0,0509	0,218	1,31	1,83	0,43	0,51	0,12	
L-Äpfelsäure (g/L)	27	26	1,301	1,290	0,0841	0,0702	0,0507		1,20	1,66		0,33		
Gesamte Milchsäure (g/L)	16 (1)	14	0,1912	0,202	0,0267	0,0145		0,209	1,84		0,13	0,49	0,08	
L-Milchsäure (g/L)	19 (1)	19	0,0677	0,0600	0,0312	0,0052	0,0203		6,02	1,54		0,35		
Reduktone (mg/L)	45 (4)	45	20,83	21,00	3,52	2,12			1,66			0,25		
Freie Schweflige Säure														
- Destillation+Photometrie	15	15	17,00	17,00	2,13	1,78			1,20			0,31		
- wie vorstehend +FTIR	30 (3)	30	19,62	19,76	3,49	2,02			1,73			0,32		
- incl. Reduktone	46	45	37,61	38,00	4,01	3,52			1,14			0,17		
- excl. Reduktone	45	45	16,39	17,00	3,68	1,78	3,52		2,07	1,05		0,16		
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)														
- Destillationsverfahren	32	31	95,05	94,00	5,72	7,598	5,36		0,75	1,07		0,19		
- jodometr. incl. Reduktone	31	30	114,85	112,60	11,09	8,85	5,36		1,25	2,07		0,38		
- jodometr. excl. Reduktone	30	30	94,58	94,00	11,19	7,59	5,36		1,47	2,09		0,38		

**Weitere Erläuterungen zu Tabelle 6 und Tabelle 7:**

**Quotient (s<sub>L</sub>/s<sub>Ü</sub>)** = Quotient der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung für die Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

**Quotient u<sub>M</sub>/s<sub>Ziel</sub>** = Quotient aus dem Standardfehler des Mittelwertes und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse herkömmlicher Methoden

**Quotient u<sub>M</sub>/s<sub>Ü</sub>** = Quotient aus dem Standardfehler des Mittelwertes und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

Blau markierte Daten sind auffällig und werden in der Regel diskutiert. Rot markierte Daten weisen auf die Überschreitung von Grenzen hin.

In der Spalte "Alle Werte" ist in Klammern die Anzahl weiterer Werte angegeben, die um mehr als 50 % vom Median abweichen und unberücksichtigt blieben.

Auch bei dem Prüfgut **FT17P05** lagen nur wenige, um mehr als 50 % vom Median abweichende, Laborergebnisse vor, die bei allen statistischen Berechnungen unberücksichtigt bleiben aber durch Z-Score bewertet werden. Erhöhte Ausschlüsse aus diesem Grund ergaben sich bei den Parametern **Reduktone** und **Freie Schweflige Säure** bei Einschluss der **FTIR-Ergebnisse**. Diese Beobachtung ist beim Parameter Reduktone regelmäßig zu machen. Bei 6 von 26 Datengruppen wurden ein bis zwei Laborergebnisse mit einem Z-Scorebetrag über 5 ausgeschlossen. Höhere Ausschlusszahlen ergaben sich nicht. Der höchstzulässige Anteil von 22,2 % ausgeschlossenen Laborergebnissen wird eingehalten.

Mäßig erhöhte Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  zwischen 1,5 und 2,0 finden sich bei sieben Parameterdatengruppen der Tabelle 7 wobei für drei Parameter (Vergärbare Zucker, reduktometrisch, Gesamte Äpfelsäure und Gesamte Milchsäure) die Zuverlässigkeit des Bezugswertes für die Bewertung der Ergebnisse mit herkömmlichen Methoden erheblich eingeschränkt ist, weil der zulässige Höchstwert 0,5 des Quotienten  $u_M/s_{Ziel}$  erreicht wird. Der Höchstwert 2,0 für den Quotienten  $s_L/s_{Ziel}$  wird bei den Parametern **Flüchtige Säure, Acetat und jodometrisch bestimmte Gesamte Schwefliger Säure** überschritten, sodass für diese Parameter **keine gültigen Z-Score** erhalten werden, zumal auch die Zuverlässigkeit der Bezugswerte deutlich eingeschränkt ist.

Zusammenfassend ergeben sich dennoch für **beide Prüfgüter** und die überwiegende Mehrzahl der Parameterdatengruppen **geeignete Bezugswerte und aussagekräftige Z-Score**.

### 3.2 Gesamtergebnis der FTIR-Untersuchungen

Beide Prüfgüter weisen Gehalte an **Gesamter Milchsäure** an der Untergrenze des Anwendungsbereichs des FTIR-Verfahrens auf. Produktuntypisch hat bei dem Prüfgut **FT17P04** kaum ein Abbau der Äpfelsäure stattgefunden. Der wahre Gehalt liegt knapp über der Bestimmungsgrenze. Deshalb macht sich der bereits bei den anderen Prüfgütern angesprochene Minderbefund in den FTIR-Messergebnissen für diesen Parameter besonders bemerkbar. Daher erfolgt die Darstellung nur für das Prüfgut **FT17P05** in der Tabelle 9 in grauer Schriftfarbe und es werden in der Datentabelle des Abschnittes 5.14.1 sowie in den Laborergebnismitteilungen für diese Parameter/Prüfgut-Kombination **keine Z-Score** ausgewiesen. Bei den anderen Parametern wird bei den Prüfgütern die Untergrenze des Anwendungsbereiches der Methode nicht erreicht.

---

#### Erläuterungen zu Tabelle 8 und Tabelle 9:

**Labor-Stdabw. ( $s_L$ )** = Standardabweichung der Werte zwischen den Laboratorien

**Zielstdabw. n. Horwitz ( $s_H$ )** = Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz

**Zielstdabw. exp. FTIR ( $s_{FTIR}$ )** = Zielstandardabweichung aus experimentellen Daten (Vergleichsstandardabweichung aus der Methodvalidierung des FTIR-Verfahrens)

**Quotient ( $s_L/s_H$ )** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung n. Horwitz

**Quotient ( $s_L/s_{FTIR}$ )** = Quotient aus der Standardabweichung zwischen den Laboratorien und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

**Quotient ( $u_M/s_{FTIR}$ )** = Quotient aus dem Standardfehler des Mittelwertes und der Zielstandardabweichung für die Bewertung der Ergebnisse des FTIR-Verfahrens

**Markierungen** wie in den Erläuterungen zu Tabelle 6 und Tabelle 7 beschrieben



**Tabelle 8: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Rotwein- Prüfgut FT17P04**

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. $s_L$	Zielstdabw n. Horwitz $s_H$	Zielstdabw exp. FTIR $s_{FTIR}$	Quotient $s_L/s_H$	Quotient $s_L/s_{FTIR}$	Quotient $u_M/s_{FTIR}$
Relative Dichte 20 °C/20 °C	83	1,01535	1,015370	0,000347		0,000146		<b>2,38</b>	0,26
Vorhandener Alkohol (g/L)	87	74,314	74,240	1,248	2,196	0,739	0,57	<b>1,69</b>	0,18
Gesamtextrakt (g/L)	55	72,063	72,000	0,787	2,140	0,415	0,37	<b>1,90</b>	0,26
Vergärbare Zucker (r) (g/L)	80	49,973	50,035	1,881	1,571	0,354	1,20	<b>5,31</b>	<b>0,59</b>
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	82	48,671	48,600	1,407	1,532	0,354	0,92	<b>3,98</b>	<b>0,44</b>
Glucose (g/L)	81	8,933	8,770	0,785	0,358	0,288	2,20	<b>2,73</b>	0,30
Fructose (g/L)	81	39,684	39,720	1,352	1,291	0,222	1,05	<b>6,09</b>	<b>0,68</b>
Glycerin (g/L)	70	5,656	5,630	0,837	0,246	0,265	3,41	<b>3,16</b>	<b>0,38</b>
pH-Wert	81	3,446	3,450	0,0843		0,0188		<b>4,48</b>	<b>0,50</b>
Gesamtsäure (g/L)	87	5,551	5,530	0,233	0,242	0,0816	0,96	<b>2,85</b>	0,31
Weinsäure (g/L)	76	2,868	2,830	0,610	0,137	0,132	4,46	<b>4,62</b>	<b>0,53</b>
Flüchtige Säure (g/L)	77	0,3838	0,3800	0,1141	0,0249	0,0427	4,59	<b>2,67</b>	0,30
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	76	2,037	2,005	0,383	0,102	0,0975	3,75	<b>3,93</b>	<b>0,45</b>
Gesamte Milchsäure (g/L)	56	0,253	0,250	0,423	0,0174	0,0805	24,30	<b>5,26</b>	<b>0,70</b>
Freie Schweflige Säure (mg/L)	17	33,62	33,00	5,425	3,119	3,119	1,74	<b>1,74</b>	0,30
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	17	124,26	128,00	9,494	9,867	5,36	0,96	<b>1,77</b>	<b>0,43</b>

**Tabelle 9: Deskriptiv-statistische Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen für das Roséwein-Prüfgut FT17P05**

Parameter	Alle Werte	Mittel-Wert	Median-Wert	Labor-Stdabw. $s_L$	Zielstdabw n. Horwitz $s_H$	Zielstdabw exp. FTIR $s_{FTIR}$	Quotient $s_L/s_H$	Quotient $s_L/s_{FTIR}$	Quotient $u_M/s_{FTIR}$
Relative Dichte 20 °C/20 °C	84	0,99752	0,997500	0,000257		0,000146		<b>1,76</b>	0,19
Vorhandener Alkohol (g/L)	88	89,492	89,500	0,843	2,574	0,739	0,33	1,14	0,12
Gesamtextrakt (g/L)	55	32,228	32,300	0,648	1,083	0,415	0,60	<b>1,56</b>	0,21
Vergärbare Zucker (r) (g/L)	81	13,720	13,660	0,722	0,521	0,354	1,38	<b>2,04</b>	0,23
Vergärbare Zucker (S) (g/L)	83	13,788	13,700	0,729	0,523	0,354	1,39	<b>2,06</b>	0,23
Glucose (g/L)	83	6,622	6,600	0,459	0,281	0,288	1,63	<b>1,59</b>	0,17
Fructose (g/L)	82	7,126	7,160	0,561	0,301	0,222	1,86	<b>2,53</b>	0,28
Glycerin (g/L)	70	4,949	5,000	0,392	0,222	0,265	1,77	1,48	0,18
pH-Wert	81	3,385	3,380	0,0729		0,0188		<b>3,88</b>	<b>0,43</b>
Gesamtsäure (g/L)	87	4,768	4,770	0,160	0,213	0,0816	0,75	<b>1,96</b>	0,21
Weinsäure (g/L)	76	2,360	2,370	0,223	0,118	0,132	1,90	<b>1,69</b>	0,19
Flüchtige Säure (g/L)	78	0,267	0,265	0,0966	0,0183	0,0427	5,28	<b>2,26</b>	0,26
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	75	1,469	1,480	0,273	0,0789	0,0975	3,46	<b>2,80</b>	0,32
Gesamte Milchsäure (g/L)	66	0,306	0,290	0,194	0,0198	0,0805	9,81	<b>2,41</b>	0,30
Freie Schweflige Säure (mg/L)	18	23,35	22,25	3,81	2,23	2,23	1,71	<b>1,71</b>	<b>0,40</b>
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	18	92,64	91,05	8,00	7,39	5,36	1,08	1,49	<b>0,35</b>

Wie in Teil 1 im Abschnitt 4.4 begründet, wurden auch für die Proben FT17P04 und FT17P05 die Ergebnisse der FTIR-Untersuchungen ergänzend einer auf sie beschränkten Gesamtauswertung unterzogen, aber keine auf dieser Grundlage berechneten Z-Score ausgewiesen. Hierbei werden die mit robusten statistischen Verfahren ermittelten, beschreibenden statistischen Kennzahlen der Laborergebnisse mit den Vergleichsstandardabweichungen des FTIR-Verfahrens verglichen. Die Daten sind für das Prüfgut FT17P04 in der Tabelle 8 und für das Prüfgut FT17P05 in der Tabelle 9 enthalten. Insgesamt bestätigen sich die im Abschnitt 5.1 des Teiles 1 und im Abschnitt 3.2 des Teiles 2 dieses Berichtes angesprochenen Probleme und Schlussfolgerungen hinsichtlich der mangelnden Übereinstimmung der FTIR-Messergebnisse, wenn diese Mängel auch bei dem Prüfgut FT17P05 etwas weniger ausgeprägt erscheinen.

Abschließend werden in der Tabelle 10 für das Prüfgut FT17P04 und in der Tabelle 11 für das Prüfgut FT17P05 die Abweichungen der Mediane der Ergebnisse herkömmlicher Verfahren und des FTIR-Verfahrens sowie die ihnen entsprechenden Z-Score-Werte auf der Basis der Matrixeffekte berücksichtigenden Zielstandardabweichungen zusammengestellt. Wie stets für den Parameter Gesamtextrakt wird bei diesem Vergleich an deren Stelle die Zielstandardabweichung für die Ergebnisse der herkömmlichen Methoden verwendet, weil deren Betrag größer ist als der Betrag der Übereinstimmungsstandardabweichung und sie auch für die Bewertung der Laborergebnisse verwendet wird. Dies gilt für das Prüfgut **FT17P04** auch für die Bewertung der Differenz bei den Messergebnissen für Vergärbare Zucker und Fructose.

**Tabelle 10: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse das Prüfgut FT17P04**

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	Ziel-StdAbw	Z-Score
Relative Dichte 20°C/20°C	1,01537	1,015400	-0,000030	0,000190	-0,16
Vorhandener Alkohol (g/L)	74,240	73,900	0,340	0,886	0,38
Gesamtextrakt (g/L)	72,000	72,80	-0,800	0,594	-1,35
Vergärbare Zucker (g/L), wie mitgeteilt	50,035	49,750	0,285	1,385	0,21
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	50,035	49,425	0,610	1,377	0,44
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	48,600	49,750	-1,150	1,385	-0,83
Glucose (g/L)	8,770	9,495	-0,725	0,408	-1,78
Fructose (g/L)	39,720	40,400	-0,680	1,134	-0,60
Glycerin (g/L)	5,630	5,585	0,045	0,348	0,13
pH-Wert	3,450	3,450	0,000	0,049	0,00
Gesamtsäure (g/L)	5,530	5,350	0,180	0,145	1,24
Weinsäure (g/L)	2,830	2,166	0,664	0,227	2,92
Flüchtige Säure (g/L)	0,380	0,2800	0,100	0,089	1,12
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	2,005	2,163	-0,158	0,218	-0,72
Gesamte Milchsäure (g/L)	0,250	0,680	-0,430	0,209	-2,06
Freie Schweflige Säure (mg/L)	33,00	27,40	5,60	2,664	2,10
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	128,00	121,00	7,00	5,36	1,31

Die erhaltenen Z-Score zeigen an, in welchem Ausmaß die "mittleren" Ergebnisse beider Gruppen verschieden sind bzw. inwieweit sich bei den Ergebnissen des FTIR-Verfahrens Matrixeffekte auf die im Vergleich mit den Ergebnissen herkömmlicher Untersuchungsmethoden erhaltenen Z-Score auswirken. Entsprechen die systematischen Matrixeffekte einem absoluten Z-Scorebetrag unter 1 so sind sie für die Praxis und die Bewertung der FTIR-Laborergebnisse nicht relevant. Bei dem Prüfgut **FT17P04** liegt dieser Z-Score aber für acht Parameter über 1,0

davon für vier Parameter sogar über 1,5 und zeigt damit erhebliche Differenzen an. Dieses aus kurzzeiterhitztem Most fructosesüß vergorene Prüfgut weist eine auffällige Häufung erhöhter Z<sub>Ü</sub>-Score der Mediane auf. Auffällig ist auch ein außergewöhnlich hoher Anteil an FTIR-Messergebnissen für **Weinsäure**, die trotz gut messbaren Gehaltes um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte abweichen (siehe Abschnitt 4.10.2). Es liegt nahe anzunehmen, dass hierfür Unterschiede in der Matrix ursächlich sind, die in der Technik der Weinbereitung begründet sind. War derartiges Probenmaterial bei der Erarbeitung der Basiskalibrierungen nicht ausreichend vertreten, so werden diese Einflüsse durch das mathematische Schätzverfahren nicht ausgeglichen. Erhöhte absolute Z-Score-Beträge der Laborergebnisse weisen daher bei diesem Prüfgut und diesen Parametern nicht mit Sicherheit auf gerätbedingte Mängel der Arbeitsbedingungen hin. Vielmehr sind speziell Matrixempfindlichkeiten der Parameterkalibrierungen als Mangelursache zu berücksichtigen.

Dahingegen zeigen beim Prüfgut **FT17P05** die Z<sub>Ü</sub>-Score der Mediane im Wesentlichen keine beachtenswerten Matrixeffekte an, wenn auch bei dem Parameter Relative Dichte ein nur formal und bei den Parametern Glucose und Gesamtsäure mäßig erhöhte Werte vorliegen. Die auffällige Abweichung bei Freier Schwefliger Säure ist nicht durch Ethylacetat bedingt, da die Untersuchungen mit <sup>1</sup>H-Kernresonanzspektroskopie keinen bestimmaren Gehalt an diesem Stoff ergeben haben. Der Befund ist daher wahrscheinlich durch den geringen Gehalt bei zugleich vorliegenden Homogenitätsmängeln beeinflusst (s. Tabelle 5).

**Tabelle 11: Differenz herkömmlicher und FTIR-Ergebnisse des Prüfgut FT17P05**

	Median FTIR	Median herk.	Differenz	ZielStdAbw	Z-Score
Relative Dichte 20°C/20°C	0,99750	0,997300	0,000200	0,000190	<b>1,05</b>
Vorhandener Alkohol (g/L)	89,500	89,200	0,300	0,886	0,34
Gesamtextrakt (g/L)	32,300	31,80	0,500	0,594	0,84
Vergärbare Zucker (g/L), wie mitgeteilt	13,660	13,990	-0,330	0,584	-0,57
Vergärbare Zucker (g/L), reduktometr.	13,660	13,900	-0,240	0,584	-0,41
Vergärbare Zucker (g/L), Summe	13,700	13,990	-0,290	0,584	-0,50
Glucose (g/L)	4,770	4,600	0,170	0,145	<b>1,17</b>
Fructose (g/L)	6,600	6,814	-0,214	0,408	-0,52
Glycerin (g/L)	7,160	7,129	0,031	0,330	0,09
pH-Wert	5,000	4,92	0,075	0,348	0,22
Gesamtsäure (g/L)	3,380	3,315	0,065	0,049	<b>1,32</b>
Weinsäure (g/L)	2,370	2,255	0,115	0,227	0,51
Flüchtige Säure (g/L)	0,265	0,2780	-0,013	0,089	-0,15
Gesamte Äpfelsäure (g/L)	1,480	1,300	0,180	0,218	0,83
Gesamte Milchsäure (g/L)	0,290	0,202	0,089	0,209	0,42
Freie Schweflige Säure (mg/L)	22,25	17,00	5,25	1,776	<b>2,96</b>
Gesamte Schweflige Säure (mg/L)	91,05	94,00	-2,95	5,36	-0,55

Weitere Details zur Bewertung der FTIR-Ergebnisse wurden in den Abschnitten 5.2 und 5.3 des ersten Teiles und im Abschnitt 3.2 des zweiten Teiles der Berichte über diese Laborvergleichsuntersuchung angesprochen. Ferner wurde auf erhebliche Matrixeffekte bereits in dem Kurzbericht hingewiesen, der den Ergebnismitteilungen für die Teilnehmer beigelegt war.

## 4 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT17P04

### 4.1 Relative Dichte 20 °C/20 °C

#### 4.1.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 8.1	1,01565	0,000250	1,89	
02	LwK 8.1	1,01545	0,000050	0,38	
03	LwK 8.1	1,01523	-0,000170	-1,29	
04	LwK 8.4	1,01539	-0,000010	-0,08	
05	LwK 8.4	1,01525	-0,000150	-1,14	
06	LwK 8.4	1,01547	0,000070	0,53	
07	LwK 8.4	1,01540	0,000000	0,00	
08	LwK 8.1	1,01525	-0,000150	-1,14	
09	LwK 8.1	1,01530	-0,000100	-0,76	
10	LwK 8.4	1,01532	-0,000080	-0,61	
11	LwK 8.4	1,01569	0,000290	2,20	
14	LwK 8.4	1,01530	-0,000100	-0,76	
15	LwK 8.4	1,01540	0,000000	0,00	
17	LwK 8.4	1,01530	-0,000100	-0,76	
18	LwK 8.4	1,01530	-0,000100	-0,76	
20	LwK 8.4	1,01546	0,000060	0,45	
21	LwK 8.4	1,01540	0,000000	0,00	
22	LwK 8.4	1,01546	0,000060	0,45	
23	LwK 8.4	1,01534	-0,000060	-0,45	
25	LwK 8.4	1,01547	0,000070	0,53	
26	LwK 8.4	1,01530	-0,000100	-0,76	
27	LwK 8.4	1,01544	0,000040	0,30	
29	LwK 8.4	1,01540	0,000000	0,00	
31	LwK 8.4	1,01537	-0,000030	-0,23	
34	LwK 8.4	1,01543	0,000030	0,23	
36	LwK 8.4	1,01530	-0,000100	-0,76	
37	LwK 8.3	1,01549	0,000090	0,68	
38	LwK 8.4	1,01550	0,000100	0,76	
39	LwK 8.4	1,01563	0,000225	1,70	
40	LwK 8.4	1,01537	-0,000030	-0,23	
41	LwK 8.4	1,01540	0,000000	0,00	
42	LwK 8.4	1,01548	0,000080	0,61	
44	LwK 8.1	1,01550	0,000100	0,76	
46	LwK 8.4	1,01545	0,000050	0,38	
48	LwK 8.4	1,01560	0,000200	1,52	
50	LwK 8.4	1,01553	0,000130	0,98	
52	LwK 8.4	1,01540	0,000005	0,04	
53	LwK 8.4	1,01560	0,000200	1,52	
54	LwK 8.4	1,01560	0,000200	1,52	
55	LwK 8.4	1,01543	0,000030	0,23	
56	LwK 8.4	1,01525	-0,000150	-1,14	
58	LwK 8.4	1,01531	-0,000090	-0,68	
60	LwK 8.4	1,01500	-0,000400	-3,03	
61	LwK 8.4	1,01550	0,000100	0,76	
64	LwK 8.4	1,01550	0,000100	0,76	
65	LwK 8.4	1,01540	0,000000	0,00	
69	LwK 8.4	0,98757	-0,027830	-210,83	(**)
96	LwK 8.4	1,01560	0,000200	1,52	
101	LwK 8.4	1,01540	0,000000	0,00	
102	LwK 8.4	1,01480	-0,000600	-4,55	

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

## 4.1.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,01570	0,000300	1,58	
202	FTIR	1,01548	0,000080	0,42	
203	FTIR	1,01530	-0,000100	-0,53	
204	FTIR	1,01549	0,000090	0,47	
205	FTIR	1,01550	0,000100	0,53	
206	FTIR	1,01490	-0,000500	-2,63	
207	FTIR	1,01537	-0,000030	-0,16	
208	FTIR	1,01490	-0,000500	-2,63	
209	FTIR	1,01491	-0,000490	-2,58	
211	FTIR	1,01534	-0,000060	-0,32	
212	FTIR	1,01530	-0,000100	-0,53	
214	FTIR	1,01550	0,000100	0,53	
215	FTIR	1,01510	-0,000300	-1,58	
216	FTIR	1,01530	-0,000100	-0,53	
217	FTIR	1,01510	-0,000300	-1,58	
218	FTIR	1,01498	-0,000420	-2,21	
219	FTIR	1,01480	-0,000600	-3,16	
220	FTIR	1,01530	-0,000100	-0,53	
221	FTIR	1,01551	0,000110	0,58	
222	FTIR	1,01564	0,000240	1,26	
223	FTIR	1,01560	0,000200	1,05	
224	FTIR	1,01520	-0,000200	-1,05	
225	FTIR	1,01534	-0,000060	-0,32	
226	FTIR	1,01530	-0,000100	-0,53	
227	FTIR	1,01540	0,000000	0,00	
228	FTIR	1,01540	0,000000	0,00	
229	FTIR	1,01499	-0,000410	-2,16	
231	FTIR	1,01540	0,000000	0,00	
232	FTIR	1,01590	0,000500	2,63	
234	FTIR	1,01519	-0,000210	-1,11	
235	FTIR	1,01540	0,000000	0,00	
236	FTIR	1,01537	-0,000030	-0,16	
237	FTIR	1,01540	0,000000	0,00	
240	FTIR	1,01554	0,000140	0,74	
241	FTIR	1,01560	0,000200	1,05	
242	FTIR	1,01533	-0,000070	-0,37	
243	FTIR	1,01580	0,000400	2,11	
244	FTIR	1,01540	0,000000	0,00	
245	FTIR	1,01580	0,000400	2,11	
246	FTIR	1,01500	-0,000400	-2,11	
247	FTIR	1,01570	0,000300	1,58	
248	FTIR	1,01570	0,000300	1,58	
249	FTIR	1,01530	-0,000100	-0,53	
250	FTIR	1,01540	0,000000	0,00	
251	FTIR	1,01550	0,000100	0,53	
252	FTIR	1,01578	0,000380	2,00	
254	FTIR	1,01560	0,000200	1,05	
255	FTIR	1,01580	0,000400	2,11	
256	FTIR	1,01529	-0,000110	-0,58	
257	FTIR	1,01540	0,000000	0,00	
258	FTIR	1,01660	0,001200	6,32	(**)
259	FTIR	1,01480	-0,000600	-3,16	
260	FTIR	1,01550	0,000100	0,53	
261	FTIR	1,01530	-0,000100	-0,53	
262	FTIR	1,01570	0,000300	1,58	
263	FTIR	1,01530	-0,000100	-0,53	
264	FTIR	1,01490	-0,000500	-2,63	
265	FTIR	1,01520	-0,000200	-1,05	
266	FTIR	1,01530	-0,000100	-0,53	
267	FTIR	1,01561	0,000210	1,11	
268	FTIR	1,01475	-0,000650	-3,42	
269	FTIR	1,01480	-0,000600	-3,16	
270	FTIR	1,01490	-0,000500	-2,63	
271	FTIR	1,01470	-0,000700	-3,68	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte herkömmlicher Verfahren ab

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
272	FTIR	1,01580	0,000400	2,11	
273	FTIR	1,01560	0,000200	1,05	
274	FTIR	1,10189	0,086488	455,20	(**)
275	FTIR	1,01720	0,001800	9,47	(**)
276	FTIR	1,01500	-0,000400	-2,11	
277	FTIR	1,01490	-0,000500	-2,63	
278	FTIR	1,01540	0,000000	0,00	
279	FTIR	1,01510	-0,000300	-1,58	
280	FTIR	1,01510	-0,000300	-1,58	
281	FTIR	1,01540	0,000000	0,00	
282	FTIR	1,01520	-0,000200	-1,05	
283	FTIR	1,01510	-0,000300	-1,58	
319	FTIR	1,01590	0,000500	2,63	
320	FTIR	1,01510	-0,000300	-1,58	
336	FTIR	1,01537	-0,000030	-0,16	
337	FTIR	1,01540	0,000000	0,00	
349	FTIR	1,01590	0,000500	2,63	
364	FTIR	1,01500	-0,000400	-2,11	
368	FTIR	1,01455	-0,000850	-4,47	

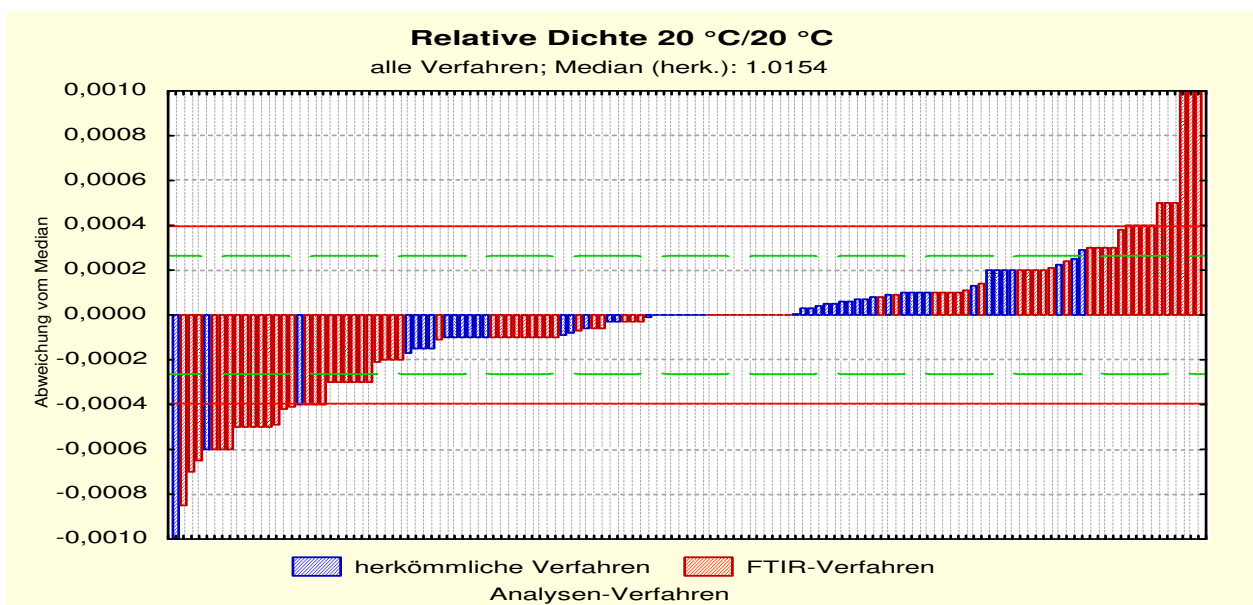
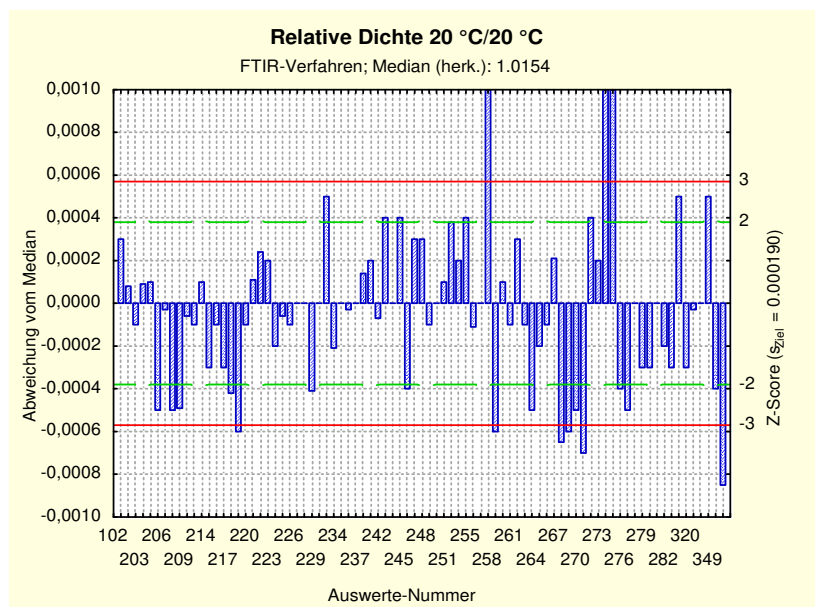
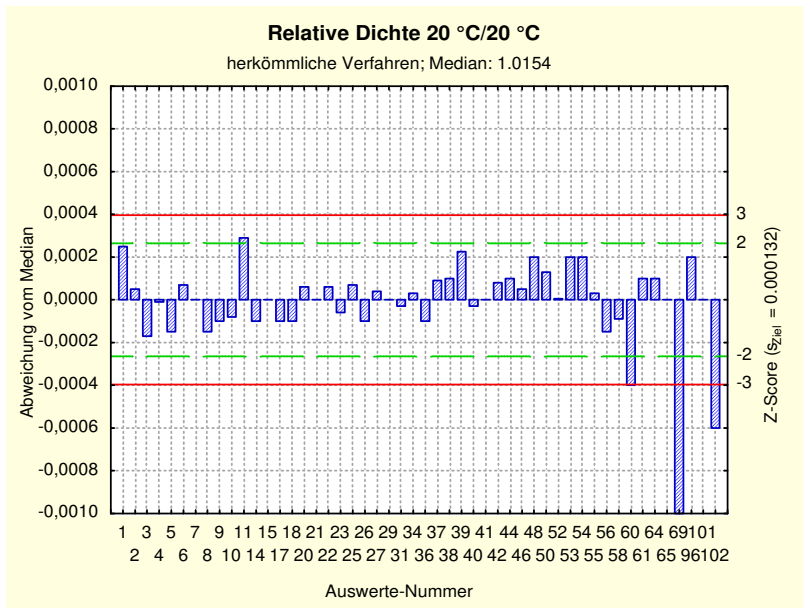
(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte herkömmlicher Verfahren ab

**4.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	50	49
Minimalwert	0,98757	1,01480
Mittelwert	1,014848	1,015404
Median	1,015400	1,015400
Maximalwert	1,01569	1,01569
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,003939	0,000155
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,000557	0,000022
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )		
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,000190	0,000190
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )		
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	29,84	1,17
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	20,73	0,81
Quotient ( $u_M/s_H$ )		
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	4,22	0,17
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	2,93	0,12

**4.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	6	1,01540	0,000187
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	1	1,01549	
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	43	1,01541	0,000126
	herkömmliche Verfahren	50	1,01541	0,000132
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	1,01535	0,000347



## 4.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

### 4.2.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 2.1	73,80	-0,100	-0,05	-0,19	
02	LwK 2.1	74,99	1,090	0,50	2,04	
03	LwK 2.4	73,42	-0,480	-0,22	-0,90	
04	LwK 2.9	74,76	0,860	0,39	1,61	
05	LwK 2.1	73,72	-0,185	-0,08	-0,35	
06	LwK 2.4	74,65	0,750	0,34	1,40	
07	LwK 2.4	73,70	-0,200	-0,09	-0,37	
08	LwK 2.1	74,20	0,300	0,14	0,56	
09	LwK 2.4	74,61	0,710	0,32	1,33	
10	LwK 2.1	74,11	0,210	0,10	0,39	
11	LwK 2.4	74,40	0,500	0,23	0,93	
14	LwK 2.9	74,19	0,290	0,13	0,54	
15	LwK 2.1	74,10	0,200	0,09	0,37	
17	LwK 2.9	74,60	0,700	0,32	1,31	
18	LwK 2.7	73,20	-0,700	-0,32	-1,31	
20	LwK 2.7	74,58	0,680	0,31	1,27	
21	LwK 2.7	73,59	-0,310	-0,14	-0,58	
22	LwK 2.9	74,20	0,300	0,14	0,56	
23	LwK 2.5	74,20	0,300	0,14	0,56	
25	LwK 2.1	73,90	0,000	0,00	0,00	
26	LwK 2.4	74,70	0,800	0,37	1,50	
27	LwK 2.5	73,60	-0,300	-0,14	-0,56	
29	LwK 2.1	74,27	0,370	0,17	0,69	
31	LwK 2.9	74,00	0,100	0,05	0,19	
34	LwK 2.8	73,30	-0,600	-0,27	-1,12	
37	LwK 2.2	74,90	1,000	0,46	1,87	
38	LwK 2.9	74,00	0,100	0,05	0,19	
39	LwK 2.9	73,80	-0,100	-0,05	-0,19	
40	LwK 2.4	74,30	0,400	0,18	0,75	
41	LwK 2.5	73,10	-0,800	-0,37	-1,50	
42	LwK 2.4	73,60	-0,300	-0,14	-0,56	
44	LwK 2.1	73,60	-0,300	-0,14	-0,56	
46	LwK 2.5	74,20	0,300	0,14	0,56	
48	LwK 2.5	73,60	-0,300	-0,14	-0,56	
50	LwK 2.9	74,30	0,400	0,18	0,75	
52	LwK 2.9	74,15	0,250	0,11	0,47	
53	LwK 2.9	74,40	0,500	0,23	0,93	
55	LwK 2.1	73,56	-0,340	-0,16	-0,64	
56	LwK 2.9	74,27	0,370	0,17	0,69	
58	LwK 2.9	74,20	0,300	0,14	0,56	
60	LwK 2.1	74,60	0,700	0,32	1,31	
61	LwK 2.7	75,40	1,500	0,69	2,80	
64	LwK 2.5	74,08	0,180	0,08	0,34	
65	LwK 2.5	74,10	0,200	0,09	0,37	
69	LwK 2.4	72,63	-1,270	-0,58	-2,37	
74	LwK 2.4	72,77	-1,132	-0,52	-2,12	
89	LwK 2.9	74,00	0,100	0,05	0,19	
91	LwK 2.9	73,70	-0,200	-0,09	-0,37	
92	LwK 2.1	73,26	-0,640	-0,29	-1,20	
94	LwK 2.5	74,00	0,100	0,05	0,19	
95	LwK 2.9	74,40	0,500	0,23	0,93	
96	LwK 2.9	73,90	0,000	0,00	0,00	
98	LwK 2.9	73,50	-0,400	-0,18	-0,75	
99	LwK 2.4	73,77	-0,130	-0,06	-0,24	
101	LwK 2.5	73,53	-0,370	-0,17	-0,69	
102	LwK 2.9	72,63	-1,270	-0,58	-2,37	
103	NMR	72,40	-1,500	-0,69	-2,80	
104	NMR	71,59	-2,307	-1,05	-4,31	
105	NMR	73,89	-0,010	-0,00	-0,02	
106	NMR	71,92	-1,984	-0,91	-3,71	
107	NMR	71,43	-2,473	-1,13	-4,62	



## 4.2.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	72,04	-1,860	-0,85	-2,10	
202	LwK 2.8	74,81	0,910	0,42	1,03	
203	LwK 2.8	74,20	0,300	0,14	0,34	
204	LwK 2.8	75,00	1,100	0,50	1,24	
205	LwK 2.8	73,48	-0,422	-0,19	-0,48	
206	LwK 2.8	74,51	0,610	0,28	0,69	
207	LwK 2.8	78,12	4,220	1,93	4,76	
208	LwK 2.8	72,00	-1,900	-0,87	-2,14	
209	LwK 2.8	73,37	-0,530	-0,24	-0,60	
211	LwK 2.8	76,00	2,100	0,96	2,37	
212	LwK 2.8	74,10	0,200	0,09	0,23	
214	LwK 2.8	75,00	1,100	0,50	1,24	
215	LwK 2.8	73,80	-0,100	-0,05	-0,11	
216	LwK 2.8	74,20	0,300	0,14	0,34	
217	LwK 2.8	75,00	1,100	0,50	1,24	
218	LwK 2.8	75,35	1,450	0,66	1,64	
219	LwK 2.8	74,00	0,100	0,05	0,11	
220	LwK 2.8	74,70	0,800	0,37	0,90	
221	LwK 2.8	74,70	0,800	0,37	0,90	
222	LwK 2.8	73,40	-0,500	-0,23	-0,56	
223	LwK 2.8	75,30	1,400	0,64	1,58	
224	LwK 2.8	74,00	0,100	0,05	0,11	
225	LwK 2.8	74,10	0,200	0,09	0,23	
226	LwK 2.8	74,60	0,700	0,32	0,79	
227	LwK 2.8	74,80	0,900	0,41	1,02	
228	LwK 2.8	73,20	-0,700	-0,32	-0,79	
229	LwK 2.8	74,02	0,120	0,05	0,14	
231	LwK 2.8	74,60	0,700	0,32	0,79	
232	LwK 2.8	73,60	-0,300	-0,14	-0,34	
234	LwK 2.8	73,30	-0,600	-0,27	-0,68	
235	LwK 2.8	74,80	0,900	0,41	1,02	
236	LwK 2.8	73,80	-0,100	-0,05	-0,11	
237	LwK 2.8	73,40	-0,500	-0,23	-0,56	
240	LwK 2.8	74,80	0,900	0,41	1,02	
241	LwK 2.8	72,60	-1,300	-0,59	-1,47	
242	LwK 2.8	75,26	1,360	0,62	1,53	
243	LwK 2.8	75,70	1,800	0,82	2,03	
244	LwK 2.8	73,73	-0,170	-0,08	-0,19	
245	LwK 2.8	73,30	-0,600	-0,27	-0,68	
246	LwK 2.8	73,40	-0,500	-0,23	-0,56	
247	LwK 2.8	73,93	0,030	0,01	0,03	
248	LwK 2.8	75,42	1,520	0,69	1,72	
249	LwK 2.8	73,90	0,000	0,00	0,00	
250	LwK 2.8	74,24	0,340	0,16	0,38	
251	LwK 2.8	72,90	-1,000	-0,46	-1,13	
252	LwK 2.8	75,75	1,850	0,85	2,09	
254	LwK 2.8	75,10	1,200	0,55	1,35	
255	LwK 2.8	73,90	0,000	0,00	0,00	
256	LwK 2.8	75,30	1,400	0,64	1,58	
257	LwK 2.8	75,50	1,600	0,73	1,81	
258	LwK 2.8	74,30	0,400	0,18	0,45	
259	LwK 2.8	76,58	2,680	1,23	3,02	
260	LwK 2.8	73,70	-0,200	-0,09	-0,23	
261	LwK 2.8	74,40	0,500	0,23	0,56	
262	LwK 2.8	73,40	-0,500	-0,23	-0,56	
263	LwK 2.8	73,00	-0,900	-0,41	-1,02	
264	LwK 2.8	76,70	2,800	1,28	3,16	
265	LwK 2.8	74,00	0,100	0,05	0,11	
266	LwK 2.8	75,99	2,090	0,96	2,36	
267	LwK 2.8	74,54	0,640	0,29	0,72	
268	LwK 2.8	74,70	0,800	0,37	0,90	
269	LwK 2.8	71,90	-2,000	-0,91	-2,26	
270	LwK 2.8	73,95	0,050	0,02	0,06	
271	LwK 2.8	79,68	5,780	2,64	6,52	(**)
272	LwK 2.8	75,50	1,600	0,73	1,81	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
273	LwK 2.8	73,05	-0,850	-0,39	-0,96	
274	LwK 2.8	71,66	-2,237	-1,02	-2,52	
275	LwK 2.8	79,60	5,700	2,61	6,43	(**)
276	LwK 2.8	74,50	0,600	0,27	0,68	
277	LwK 2.8	74,37	0,471	0,22	0,53	
278	LwK 2.8	72,49	-1,410	-0,64	-1,59	
279	LwK 2.8	73,26	-0,640	-0,29	-0,72	
280	LwK 2.8	76,50	2,600	1,19	2,93	
281	LwK 2.8	72,38	-1,520	-0,69	-1,72	
282	LwK 2.8	76,80	2,900	1,33	3,27	
283	LwK 2.8	75,90	2,000	0,91	2,26	
312	LwK 2.8	74,70	0,800	0,37	0,90	
319	LwK 2.8	69,90	-4,000	-1,83	-4,51	
320	LwK 2.8	74,20	0,300	0,14	0,34	
323	LwK 2.8	75,50	1,600	0,73	1,81	
336	LwK 2.8	73,70	-0,200	-0,09	-0,23	
337	LwK 2.8	73,30	-0,600	-0,27	-0,68	
343	LwK 2.8	74,49	0,590	0,27	0,67	
349	LwK 2.8	70,10	-3,800	-1,74	-4,29	
364	LwK 2.8	76,10	2,200	1,01	2,48	
368	LwK 2.8	74,85	0,950	0,43	1,07	

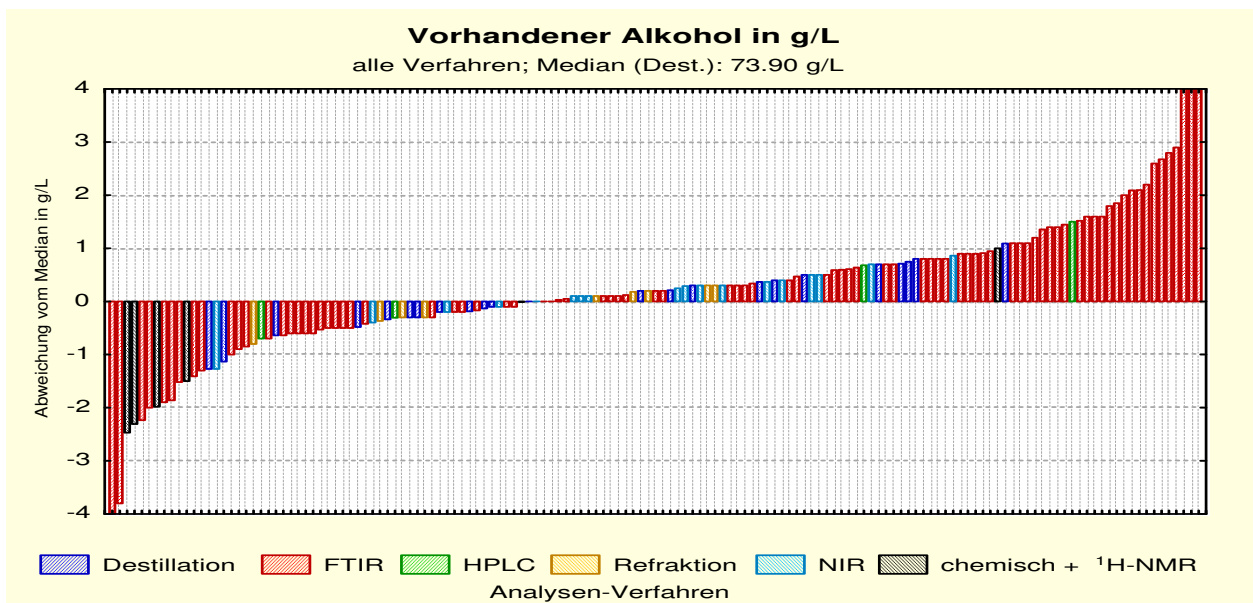
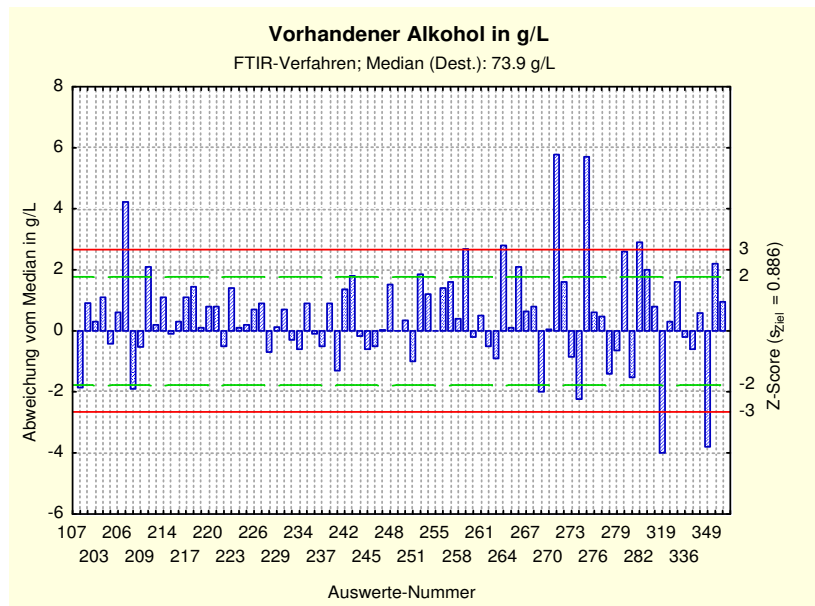
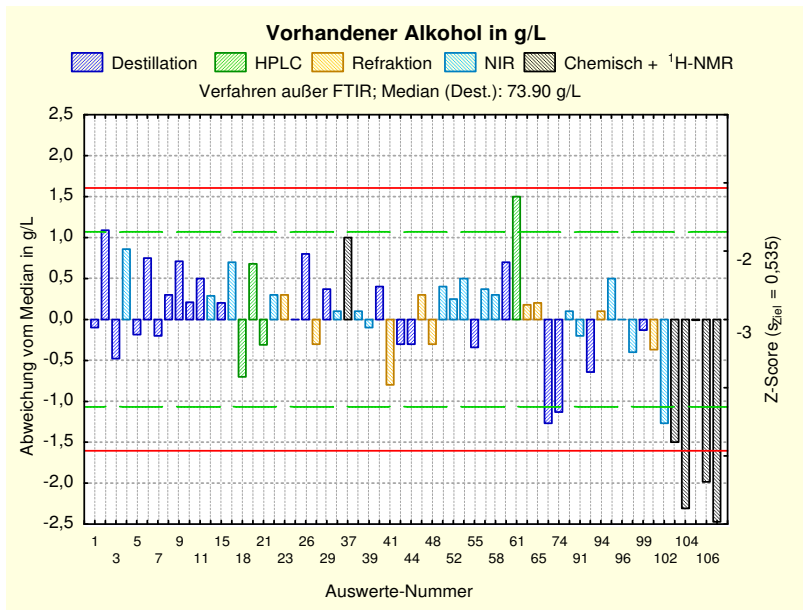
(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab

**4.2.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol [g/L] nur Destillationsverfahren	alle Daten
Gültige Werte	23
Minimalwert	72,63
Mittelwert	73,941
Median	73,900
Maximalwert	74,99
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,603
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,126
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,188
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ FTIR}$ )	0,886
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,28
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,13
Quotient ( $s_L/s_{exp\ FTIR}$ )	0,68
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,06
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,23
Quotient ( $u_M/s_{FTIR}$ )	0,14

**4.2.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren- Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	12	73,986	0,487
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	11 23	73,868 73,968	0,832 0,600
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	1	74,900	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	9	73,844	0,389
LwK 2.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie, z.B. n. Heidger	4	74,193	1,126
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	87	74,314	1,248
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektroskopie	18	74,107	0,356
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	72,242	1,116



### 4.3 Gesamtextrakt [g/L]

#### 4.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 3.2	72,40	-0,40	-0,19	-0,67	
02	spezial_1	72,99	0,19	0,09	0,32	
03	LwK 3.3	72,80	0,00	0,00	0,00	
04	LwK 3.3	73,20	0,40	0,19	0,67	
06	LwK 3.3	73,20	0,40	0,19	0,67	
07	LwK 3.3	72,70	-0,10	-0,05	-0,17	
08	LwK 3.2	7,26	-65,54	-30,34	-110,34	(*)
09	LwK 3.1	72,80	0,00	0,00	0,00	
10	LwK 3.3	72,80	0,00	0,00	0,00	
11	LwK 3.3	73,70	0,90	0,42	1,52	
14	LwK 3.3	72,80	0,00	0,00	0,00	
15	LwK 3.2	73,00	0,20	0,09	0,34	
17	LwK 3.3	72,70	-0,10	-0,05	-0,17	
18	LwK 3.2	72,20	-0,60	-0,28	-1,01	
20	LwK 3.3	73,20	0,40	0,19	0,67	
21	LwK 3.3	72,80	0,00	0,00	0,00	
22	LwK 3.3	73,00	0,20	0,09	0,34	
23	LwK 3.3	72,70	-0,10	-0,05	-0,17	
25	LwK 3.2	72,80	0,00	0,00	0,00	
26	LwK 3.3	72,77	-0,03	-0,01	-0,04	
27	LwK 3.3	72,90	0,10	0,05	0,17	
29	LwK 3.2	72,90	0,10	0,05	0,17	
31	LwK 3.3	72,70	-0,10	-0,05	-0,17	
34	LwK 3.3	72,60	-0,20	-0,09	-0,34	
38	LwK 3.3	73,10	0,30	0,14	0,51	
39	LwK 3.3	73,30	0,50	0,23	0,84	
40	LwK 3.3	25,50	-47,30	-21,90	-79,63	(*)
41	LwK 3.3	72,50	-0,30	-0,14	-0,51	
42	LwK 3.3	72,90	0,10	0,05	0,17	
46	LwK 3.3	73,00	0,20	0,09	0,34	
48	LwK 3.3	73,10	0,30	0,14	0,51	
50	LwK 3.3	73,20	0,40	0,19	0,67	
52	LwK 3.1	72,80	0,00	0,00	0,00	
53	LwK 3.3	73,60	0,80	0,37	1,35	
56	LwK 3.3	72,50	-0,30	-0,14	-0,51	
58	LwK 3.3	72,67	-0,13	-0,06	-0,22	
60	LwK 3.2	72,00	-0,80	-0,37	-1,35	
61	LwK 3.3	73,60	0,80	0,37	1,35	
96	LwK 3.3	73,30	0,50	0,23	0,84	

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.

#### 4.3.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	71,54	-1,26	-0,58	-2,12	
202	FTIR	72,69	-0,11	-0,05	-0,19	
203	FTIR	72,90	0,10	0,05	0,17	
204	FTIR	73,30	0,50	0,23	0,84	
206	FTIR	72,09	-0,71	-0,33	-1,20	
209	FTIR	70,80	-2,00	-0,93	-3,37	
211	FTIR	73,30	0,50	0,23	0,84	
215	FTIR	71,50	-1,30	-0,60	-2,19	
216	FTIR	70,52	-2,28	-1,06	-3,84	
217	FTIR	71,80	-1,00	-0,46	-1,68	
218	FTIR	72,30	-0,50	-0,23	-0,84	
219	FTIR	72,10	-0,70	-0,32	-1,18	
220	FTIR	71,10	-1,70	-0,79	-2,86	
221	FTIR	71,70	-1,10	-0,51	-1,85	
223	FTIR	71,30	-1,50	-0,69	-2,53	
225	FTIR	71,53	-1,27	-0,59	-2,14	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
226	FTIR	72,40	-0,40	-0,19	-0,67	
227	FTIR	71,99	-0,81	-0,38	-1,36	
228	FTIR	72,60	-0,20	-0,09	-0,34	
232	FTIR	71,98	-0,82	-0,38	-1,38	
235	FTIR	72,00	-0,80	-0,37	-1,35	
236	FTIR	71,70	-1,10	-0,51	-1,85	
237	FTIR	72,30	-0,50	-0,23	-0,84	
240	FTIR	73,00	0,20	0,09	0,34	
246	FTIR	72,20	-0,60	-0,28	-1,01	
247	FTIR	72,15	-0,65	-0,30	-1,09	
249	FTIR	72,60	-0,20	-0,09	-0,34	
251	FTIR	72,50	-0,30	-0,14	-0,51	
252	FTIR	72,81	0,01	0,00	0,02	
254	FTIR	72,80	0,00	0,00	0,00	
258	FTIR	71,90	-0,90	-0,42	-1,52	
259	FTIR	72,00	-0,80	-0,37	-1,35	
260	LwK 3.2	73,00	0,20	0,09	0,34	
261	FTIR	71,80	-1,00	-0,46	-1,68	
262	FTIR	72,10	-0,70	-0,32	-1,18	
263	FTIR	71,80	-1,00	-0,46	-1,68	
264	FTIR	72,80	0,00	0,00	0,00	
266	FTIR	72,50	-0,30	-0,14	-0,51	
267	FTIR	73,62	0,82	0,38	1,38	
268	FTIR	71,80	-1,00	-0,46	-1,68	
269	FTIR	70,70	-2,10	-0,97	-3,54	
270	FTIR	72,00	-0,80	-0,37	-1,35	
271	FTIR	72,72	-0,08	-0,04	-0,13	
272	FTIR	73,40	0,60	0,28	1,01	
273	FTIR	71,43	-1,37	-0,63	-2,31	
275	FTIR	70,80	-2,00	-0,93	-3,37	
276	FTIR	123,20	50,40	23,33	84,85	(*)
278	FTIR	71,20	-1,60	-0,74	-2,69	
279	FTIR	71,33	-1,47	-0,68	-2,47	
280	FTIR	70,70	-2,10	-0,97	-3,54	
281	FTIR	71,76	-1,04	-0,48	-1,75	
282	FTIR	71,00	-1,80	-0,83	-3,03	
283	FTIR	72,10	-0,70	-0,32	-1,18	
320	FTIR	72,90	0,10	0,05	0,17	
336	FTIR	71,71	-1,09	-0,50	-1,84	
337	FTIR	72,40	-0,40	-0,19	-0,67	

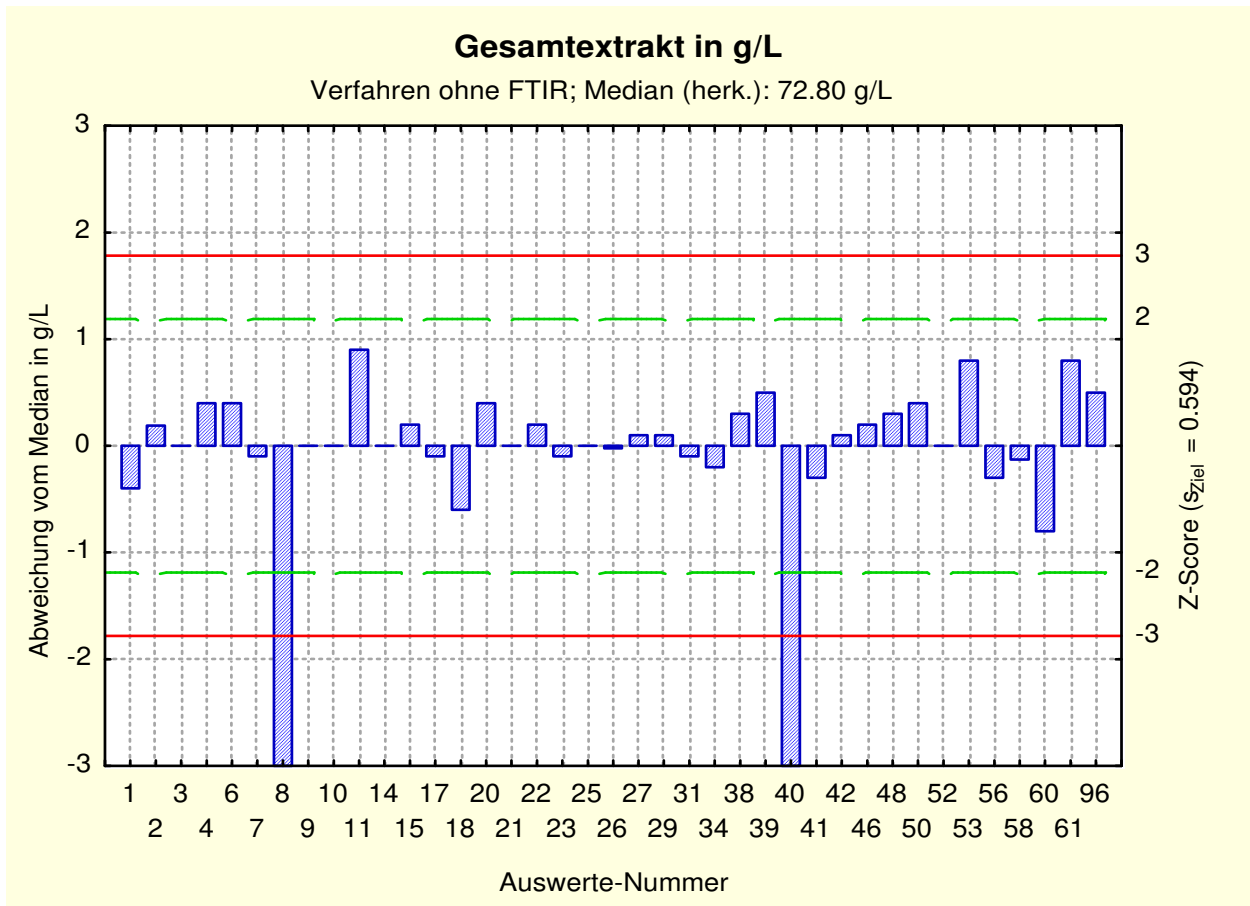
**4.3.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

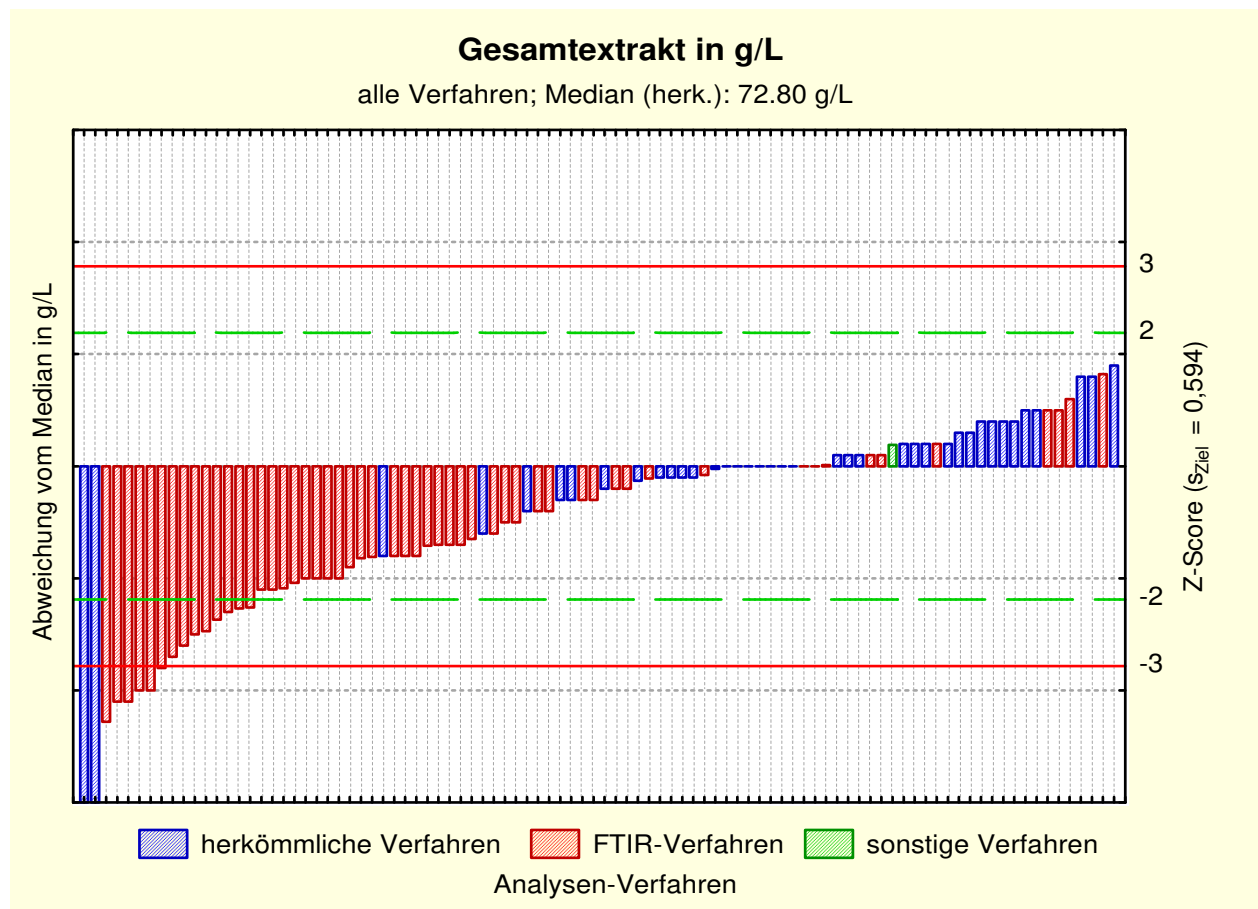
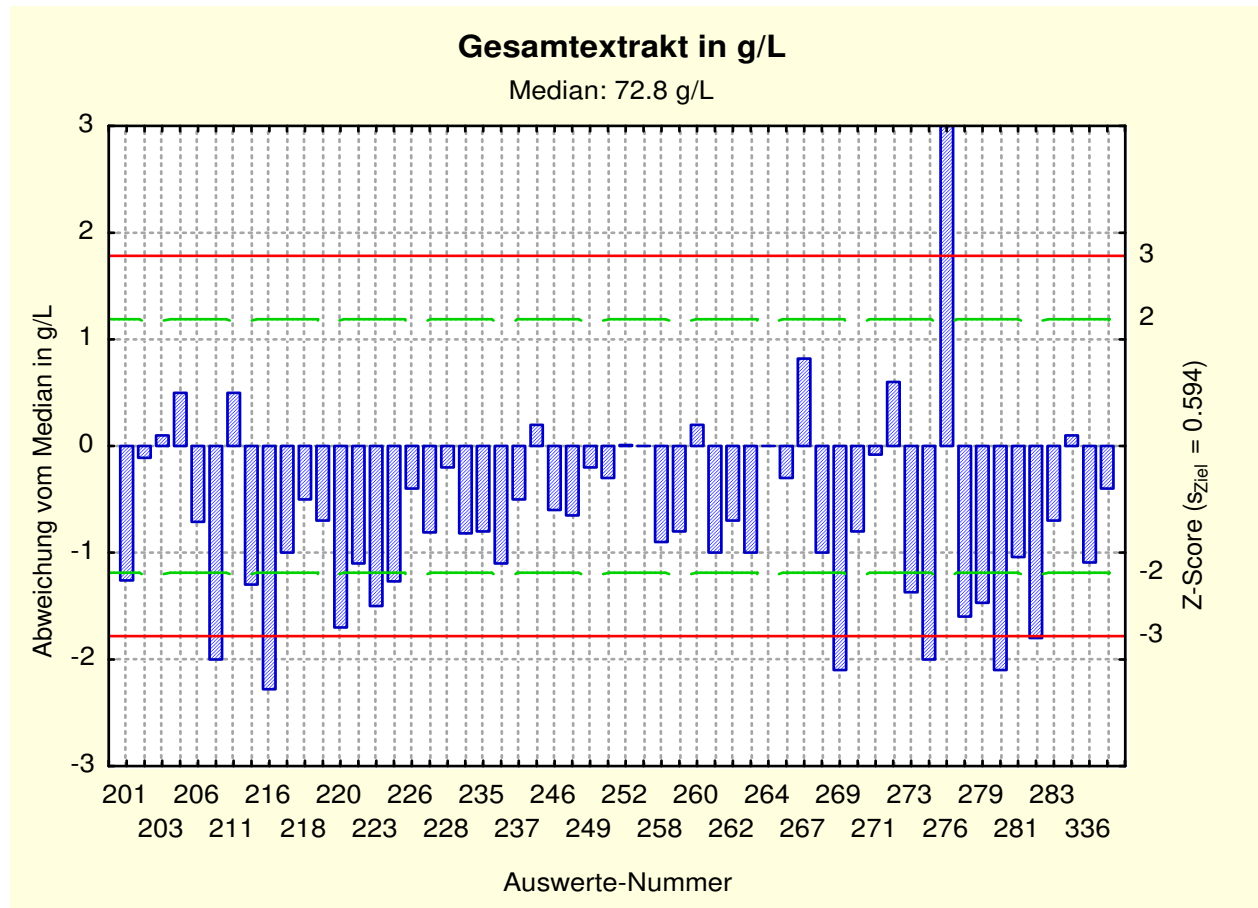
Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	36
Minimalwert	72,0
Mittelwert	72,90
Median	72,80
Maximalwert	73,7
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,365
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,061
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,160
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ ) <sup>1)</sup>	(0,565)
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,17
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,61
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,65)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,03
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,10
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	(0,11)

<sup>1)</sup> Die FTIR-Laboreergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung  $s_{exp\ herk}$  bewertet.

**4.3.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	2	72,800	0,000
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	8	72,487	0,592
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	29	72,939	0,343
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	38	72,855	0,356
spezial_1	Berechnung nach Tabarie, Messung mit DR Gerät	55	72,063	0,787
		1	72,990	





## 4.4 Vergärbare Zucker [g/L]

### 4.4.1 Herkömmliche Laborergebnisse

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
03	LwK 4.5	49,70	-0,050	-0,03	-0,04	
04	LwK 4.5	51,34	1,595	1,02	1,15	
06	LwK 4.5	51,20	1,450	0,93	1,05	
07	LwK 4.5	49,17	-0,580	-0,37	-0,42	
08	LwK 4.5	48,74	-1,010	-0,65	-0,73	
09	LwK 4.5	51,42	1,670	1,07	1,20	
10	LwK 4.5	49,30	-0,450	-0,29	-0,32	
11	LwK 4.1	44,30	-5,450	-3,49	-3,93	
14	LwK 4.5	54,00	4,250	2,72	3,07	
15	LwK 4.5	52,20	2,450	1,57	1,77	
18	LwK 4.7	52,00	2,250	1,44	1,62	
20	LwK 4.7	49,88	0,130	0,08	0,09	
21	LwK 4.7	49,53	-0,220	-0,14	-0,16	
22	NMR	48,60	-1,150	-0,74	-0,83	
23	LwK 4.4	48,50	-1,250	-0,80	-0,90	
25	LwK 4.5	50,47	0,720	0,46	0,52	
26	LwK 4.7	48,81	-0,940	-0,60	-0,68	
27	LwK 4.4	52,70	2,950	1,89	2,13	
29	LwK 4.5	49,80	0,050	0,03	0,04	
31	LwK 4.5	51,30	1,550	0,99	1,12	
34	LwK 4.8	52,90	3,150	2,02	2,27	
37	LwK 4.3	50,14	0,390	0,25	0,28	
38	LwK 4.5	51,70	1,950	1,25	1,41	
39	LwK 4.7	48,70	-1,050	-0,67	-0,76	
40	LwK 4.5	37,38	-12,370	-7,91	-8,92	(**)
41	LwK 4.5	51,16	1,410	0,90	1,02	
42	LwK 4.7	49,40	-0,350	-0,22	-0,25	
44	LwK 4.5	49,48	-0,270	-0,17	-0,19	
46	LwK 4.5	52,80	3,050	1,95	2,20	
48	LwK 4.5	50,85	1,100	0,70	0,79	
50	LwK 4.7	51,17	1,420	0,91	1,02	
52	LwK 4.5	48,55	-1,200	-0,77	-0,87	
53	LwK 4.5	49,50	-0,250	-0,16	-0,18	
55	LwK 4.5	49,40	-0,350	-0,22	-0,25	
56	LwK 4.5	49,01	-0,740	-0,47	-0,53	
58	LwK 4.4	48,40	-1,350	-0,86	-0,97	
60	LwK 4.4	52,84	3,090	1,98	2,23	
61	LwK 4.7	47,90	-1,850	-1,18	-1,33	
64	LwK 4.4	49,25	-0,500	-0,32	-0,36	
74	LwK 4.4	49,60	-0,150	-0,10	-0,11	
77	LwK 4.4	48,36	-1,390	-0,89	-1,00	
92	LwK 4.5	51,04	1,290	0,83	0,93	
94	LwK 4.7	49,60	-0,150	-0,10	-0,11	
96	LwK 4.7	49,20	-0,550	-0,35	-0,40	
101	LwK 4.4	50,40	0,650	0,42	0,47	
103	NMR	48,50	-1,250	-0,80	-0,90	
104	NMR	47,15	-2,596	-1,66	-1,87	
105	NMR	49,75	0,000	0,00	0,00	
106	NMR	45,55	-4,204	-2,69	-3,03	
107	NMR	52,39	2,643	1,69	1,91	

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.



**4.4.2 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker**

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	54,66	4,910	3,14	3,54	
203	LwK 4.8	50,12	0,370	0,24	0,27	
204	LwK 4.8	51,12	1,371	0,88	0,99	
206	LwK 4.8	48,11	-1,640	-1,05	-1,18	
207	LwK 4.8	50,00	0,250	0,16	0,18	
208	LwK 4.8	49,20	-0,550	-0,35	-0,40	
209	LwK 4.8	48,83	-0,920	-0,59	-0,66	
211	LwK 4.8	47,58	-2,170	-1,39	-1,57	
212	LwK 4.8	49,40	-0,350	-0,22	-0,25	
214	LwK 4.8	51,40	1,650	1,06	1,19	
215	LwK 4.8	49,39	-0,360	-0,23	-0,26	
216	LwK 4.8	46,11	-3,640	-2,33	-2,63	
217	LwK 4.8	50,05	0,300	0,19	0,22	
218	LwK 4.8	50,51	0,760	0,49	0,55	
220	LwK 4.8	53,42	3,670	2,35	2,65	
221	LwK 4.8	51,44	1,690	1,08	1,22	
222	LwK 4.8	50,10	0,350	0,22	0,25	
223	LwK 4.8	49,90	0,150	0,10	0,11	
224	LwK 4.8	49,62	-0,130	-0,08	-0,09	
225	LwK 4.8	51,29	1,540	0,99	1,11	
226	LwK 4.8	48,00	-1,750	-1,12	-1,26	
227	LwK 4.8	51,91	2,160	1,38	1,56	
228	LwK 4.8	51,36	1,610	1,03	1,16	
229	LwK 4.8	48,94	-0,810	-0,52	-0,58	
232	LwK 4.8	46,72	-3,030	-1,94	-2,19	
234	LwK 4.8	52,90	3,150	2,02	2,27	
235	LwK 4.8	51,80	2,050	1,31	1,48	
236	LwK 4.8	50,44	0,690	0,44	0,50	
237	LwK 4.8	51,80	2,050	1,31	1,48	
240	LwK 4.8	53,12	3,370	2,16	2,43	
241	LwK 4.8	49,90	0,150	0,10	0,11	
242	LwK 4.8	49,08	-0,670	-0,43	-0,48	
243	LwK 4.8	49,90	0,150	0,10	0,11	
244	LwK 4.8	50,37	0,620	0,40	0,45	
245	LwK 4.8	50,02	0,270	0,17	0,19	
246	LwK 4.8	52,10	2,350	1,50	1,70	
247	LwK 4.8	49,14	-0,610	-0,39	-0,44	
248	LwK 4.8	51,38	1,630	1,04	1,18	
249	LwK 4.8	47,80	-1,950	-1,25	-1,41	
250	LwK 4.8	50,51	0,760	0,49	0,55	
251	LwK 4.8	46,30	-3,450	-2,21	-2,49	
252	LwK 4.8	50,90	1,150	0,74	0,83	
254	LwK 4.8	52,50	2,750	1,76	1,98	
255	LwK 4.8	50,40	0,650	0,42	0,47	
256	LwK 4.8	49,80	0,050	0,03	0,04	
257	LwK 4.8	51,00	1,250	0,80	0,90	
258	LwK 4.8	48,44	-1,310	-0,84	-0,95	
259	LwK 4.8	61,95	12,200	7,81	8,80	(**)
260	LwK 4.8	49,50	-0,250	-0,16	-0,18	
261	LwK 4.8	46,60	-3,150	-2,02	-2,27	
262	LwK 4.8	48,20	-1,550	-0,99	-1,12	
263	LwK 4.8	49,10	-0,650	-0,42	-0,47	
264	LwK 4.8	50,30	0,550	0,35	0,40	
265	LwK 4.8	50,72	0,970	0,62	0,70	
266	LwK 4.8	47,72	-2,030	-1,30	-1,46	
267	LwK 4.8	49,94	0,190	0,12	0,14	
268	LwK 4.8	51,00	1,250	0,80	0,90	
269	LwK 4.8	74,80	25,050	16,03	18,07	(*)
270	LwK 4.8	48,10	-1,650	-1,06	-1,19	
271	LwK 4.8	49,56	-0,190	-0,12	-0,14	
272	LwK 4.8	49,70	-0,050	-0,03	-0,04	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
273	LwK 4.8	51,16	1,410	0,90	1,02	
274	LwK 4.8	49,36	-0,390	-0,25	-0,28	
275	LwK 4.8	51,70	1,950	1,25	1,41	
276	LwK 4.8	51,10	1,350	0,86	0,97	
277	LwK 4.8	42,33	-7,420	-4,75	-5,35	(**)
278	LwK 4.8	47,35	-2,400	-1,54	-1,73	
279	LwK 4.8	48,57	-1,180	-0,75	-0,85	
280	LwK 4.8	45,20	-4,550	-2,91	-3,28	
281	LwK 4.8	47,61	-2,140	-1,37	-1,54	
282	LwK 4.8	48,00	-1,750	-1,12	-1,26	
283	LwK 4.8	50,40	0,650	0,42	0,47	
319	LwK 4.8	47,70	-2,050	-1,31	-1,48	
320	LwK 4.8	50,78	1,030	0,66	0,74	
336	LwK 4.8	50,49	0,740	0,47	0,53	
337	LwK 4.8	51,60	1,850	1,18	1,33	
349	LwK 4.8	48,30	-1,450	-0,93	-1,05	
364	LwK 4.8	50,50	0,750	0,48	0,54	
368	LwK 4.8	51,35	1,600	1,02	1,15	

(\*\*)Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**4.4.3 Reduktometrische Laboreergebnisse**

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
11	LwK 4.1	44,30	-5,125	-3,30	-3,72	
23	LwK 4.4	48,50	-0,925	-0,60	-0,67	
27	LwK 4.4	52,70	3,275	2,11	2,38	
37	LwK 4.3	50,14	0,715	0,46	0,52	
58	LwK 4.4	48,40	-1,025	-0,66	-0,74	
60	LwK 4.4	52,84	3,415	2,20	2,48	
64	LwK 4.4	49,25	-0,175	-0,11	-0,13	
74	LwK 4.4	49,60	0,175	0,11	0,13	
77	LwK 4.4	48,36	-1,065	-0,69	-0,77	
101	LwK 4.4	50,40	0,975	0,63	0,71	

**4.4.4 FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(r)**

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	54,66	5,235	3,37	3,80	
203	LwK 4.8	50,12	0,695	0,45	0,50	
204	LwK 4.8	51,12	1,696	1,09	1,23	
206	LwK 4.8	48,11	-1,315	-0,85	-0,95	
207	LwK 4.8	50,00	0,575	0,37	0,42	
208	LwK 4.8	49,20	-0,225	-0,14	-0,16	
209	LwK 4.8	48,83	-0,595	-0,38	-0,43	
211	LwK 4.8	47,58	-1,845	-1,19	-1,34	
212	LwK 4.8	49,40	-0,025	-0,02	-0,02	
214	LwK 4.8	51,40	1,975	1,27	1,43	
215	LwK 4.8	49,39	-0,035	-0,02	-0,03	
216	LwK 4.8	46,11	-3,315	-2,13	-2,41	
217	LwK 4.8	50,05	0,625	0,40	0,45	
218	LwK 4.8	50,51	1,085	0,70	0,79	
220	LwK 4.8	53,42	3,995	2,57	2,90	
221	LwK 4.8	51,44	2,015	1,30	1,46	
222	LwK 4.8	50,10	0,675	0,43	0,49	
223	LwK 4.8	49,90	0,475	0,31	0,34	
224	LwK 4.8	49,62	0,195	0,13	0,14	
225	LwK 4.8	51,29	1,865	1,20	1,35	
226	LwK 4.8	48,00	-1,425	-0,92	-1,03	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(r)**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
227	LwK 4.8	51,91	2,485	1,60	1,80	
228	LwK 4.8	51,36	1,935	1,24	1,40	
229	LwK 4.8	48,94	-0,485	-0,31	-0,35	
232	LwK 4.8	46,72	-2,705	-1,74	-1,96	
234	LwK 4.8	52,90	3,475	2,24	2,52	
235	LwK 4.8	51,80	2,375	1,53	1,72	
236	LwK 4.8	50,44	1,015	0,65	0,74	
237	LwK 4.8	51,80	2,375	1,53	1,72	
240	LwK 4.8	53,12	3,695	2,38	2,68	
241	LwK 4.8	49,90	0,475	0,31	0,34	
242	LwK 4.8	49,08	-0,345	-0,22	-0,25	
243	LwK 4.8	49,90	0,475	0,31	0,34	
244	LwK 4.8	50,37	0,945	0,61	0,69	
245	LwK 4.8	50,02	0,595	0,38	0,43	
246	LwK 4.8	52,10	2,675	1,72	1,94	
247	LwK 4.8	49,14	-0,285	-0,18	-0,21	
248	LwK 4.8	51,38	1,955	1,26	1,42	
249	LwK 4.8	47,80	-1,625	-1,05	-1,18	
250	LwK 4.8	50,51	1,085	0,70	0,79	
251	LwK 4.8	46,30	-3,125	-2,01	-2,27	
252	LwK 4.8	50,90	1,475	0,95	1,07	
254	LwK 4.8	52,50	3,075	1,98	2,23	
255	LwK 4.8	50,40	0,975	0,63	0,71	
256	LwK 4.8	49,80	0,375	0,24	0,27	
257	LwK 4.8	51,00	1,575	1,01	1,14	
258	LwK 4.8	48,44	-0,985	-0,63	-0,72	
259	LwK 4.8	61,95	12,525	8,06	9,09	(**)
260	LwK 4.8	49,50	0,075	0,05	0,05	
261	LwK 4.8	46,60	-2,825	-1,82	-2,05	
262	LwK 4.8	48,20	-1,225	-0,79	-0,89	
263	LwK 4.8	49,10	-0,325	-0,21	-0,24	
264	LwK 4.8	50,30	0,875	0,56	0,64	
265	LwK 4.8	50,72	1,295	0,83	0,94	
266	LwK 4.8	47,72	-1,705	-1,10	-1,24	
267	LwK 4.8	49,94	0,515	0,33	0,37	
268	LwK 4.8	51,00	1,575	1,01	1,14	
269	LwK 4.8	74,80	25,375	16,32	18,42	(*)
270	LwK 4.8	48,10	-1,325	-0,85	-0,96	
271	LwK 4.8	49,56	0,135	0,09	0,10	
272	LwK 4.8	49,70	0,275	0,18	0,20	
273	LwK 4.8	51,16	1,735	1,12	1,26	
274	LwK 4.8	49,36	-0,065	-0,04	-0,05	
275	LwK 4.8	51,70	2,275	1,46	1,65	
276	LwK 4.8	51,10	1,675	1,08	1,22	
277	LwK 4.8	42,33	-7,095	-4,56	-5,15	(**)
278	LwK 4.8	47,35	-2,075	-1,33	-1,51	
279	LwK 4.8	48,57	-0,855	-0,55	-0,62	
280	LwK 4.8	45,20	-4,225	-2,72	-3,07	
281	LwK 4.8	47,61	-1,815	-1,17	-1,32	
282	LwK 4.8	48,00	-1,425	-0,92	-1,03	
283	LwK 4.8	50,40	0,975	0,63	0,71	
319	LwK 4.8	47,70	-1,725	-1,11	-1,25	
320	LwK 4.8	50,78	1,355	0,87	0,98	
336	LwK 4.8	50,49	1,065	0,69	0,77	
337	LwK 4.8	51,60	2,175	1,40	1,58	
349	LwK 4.8	48,30	-1,125	-0,72	-0,82	
364	LwK 4.8	50,50	1,075	0,69	0,78	
368	LwK 4.8	51,35	1,925	1,24	1,40	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der reduktometrischen Werte ab.

(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der reduktometrischen Werte ab.

**4.4.5 FTIR-Laboregebnisse für Vergärbare Zucker(S)**

(Bewertungsbasis: Hochleistungsflüssigkeitschromatographie und Enzymatik; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	49,85	0,100	0,06	0,07	
202	LwK 4.8	47,88	-1,870	-1,20	-1,35	
203	LwK 4.8	48,77	-0,980	-0,63	-0,71	
204	LwK 4.8	50,19	0,441	0,28	0,32	
205	LwK 4.8	50,71	0,960	0,61	0,69	
206	LwK 4.8	48,11	-1,640	-1,05	-1,18	
207	LwK 4.8	49,40	-0,350	-0,22	-0,25	
208	LwK 4.8	49,10	-0,650	-0,42	-0,47	
209	LwK 4.8	48,83	-0,920	-0,59	-0,66	
211	LwK 4.8	51,46	1,710	1,09	1,23	
212	LwK 4.8	48,66	-1,090	-0,70	-0,79	
214	LwK 4.8	47,80	-1,950	-1,25	-1,41	
215	LwK 4.8	50,89	1,140	0,73	0,82	
216	LwK 4.8	46,24	-3,510	-2,25	-2,53	
217	LwK 4.8	45,03	-4,720	-3,02	-3,41	
218	LwK 4.8	49,55	-0,200	-0,13	-0,14	
219	LwK 4.8	48,60	-1,150	-0,74	-0,83	
220	LwK 4.8	48,94	-0,810	-0,52	-0,58	
221	LwK 4.8	45,41	-4,340	-2,78	-3,13	
222	LwK 4.8	52,00	2,250	1,44	1,62	
223	LwK 4.8	47,80	-1,950	-1,25	-1,41	
224	LwK 4.8	49,52	-0,230	-0,15	-0,17	
225	LwK 4.8	49,52	-0,230	-0,15	-0,17	
226	LwK 4.8	50,70	0,950	0,61	0,69	
227	LwK 4.8	48,43	-1,320	-0,84	-0,95	
228	LwK 4.8	47,86	-1,890	-1,21	-1,36	
229	LwK 4.8	47,92	-1,830	-1,17	-1,32	
231	LwK 4.8	48,60	-1,150	-0,74	-0,83	
232	LwK 4.8	46,72	-3,030	-1,94	-2,19	
234	LwK 4.8	48,24	-1,510	-0,97	-1,09	
235	LwK 4.8	48,10	-1,650	-1,06	-1,19	
236	LwK 4.8	48,17	-1,580	-1,01	-1,14	
237	LwK 4.8	47,70	-2,050	-1,31	-1,48	
240	LwK 4.8	48,90	-0,850	-0,54	-0,61	
241	LwK 4.8	48,20	-1,550	-0,99	-1,12	
242	LwK 4.8	48,07	-1,680	-1,07	-1,21	
243	LwK 4.8	49,00	-0,750	-0,48	-0,54	
244	LwK 4.8	47,71	-2,040	-1,31	-1,47	
245	LwK 4.8	48,41	-1,340	-0,86	-0,97	
246	LwK 4.8	49,20	-0,550	-0,35	-0,40	
247	LwK 4.8	47,59	-2,160	-1,38	-1,56	
249	LwK 4.8	47,70	-2,050	-1,31	-1,48	
250	LwK 4.8	48,10	-1,650	-1,06	-1,19	
251	LwK 4.8	46,30	-3,450	-2,21	-2,49	
252	LwK 4.8	51,28	1,530	0,98	1,10	
254	LwK 4.8	49,30	-0,450	-0,29	-0,32	
256	LwK 4.8	48,80	-0,950	-0,61	-0,69	
257	LwK 4.8	49,23	-0,520	-0,33	-0,38	
258	LwK 4.8	45,15	-4,600	-2,94	-3,32	
259	LwK 4.8	60,17	10,420	6,67	7,52	(**)
260	LwK 4.8	47,60	-2,150	-1,38	-1,55	
261	LwK 4.8	48,10	-1,650	-1,06	-1,19	
262	LwK 4.8	46,50	-3,250	-2,08	-2,34	
263	LwK 4.8	49,10	-0,650	-0,42	-0,47	
264	LwK 4.8	48,90	-0,850	-0,54	-0,61	
265	LwK 4.8	48,21	-1,540	-0,99	-1,11	
266	LwK 4.8	51,32	1,570	1,00	1,13	
267	LwK 4.8	48,58	-1,170	-0,75	-0,84	
268	LwK 4.8	48,70	-1,050	-0,67	-0,76	
270	LwK 4.8	48,70	-1,050	-0,67	-0,76	
271	LwK 4.8	49,59	-0,160	-0,10	-0,12	
272	LwK 4.8	50,70	0,950	0,61	0,69	
273	LwK 4.8	50,50	0,750	0,48	0,54	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
275	LwK 4.8	48,50	-1,250	-0,80	-0,90	
276	LwK 4.8	47,00	-2,750	-1,76	-1,98	
277	LwK 4.8	42,33	-7,420	-4,75	-5,35	(**)
278	LwK 4.8	50,17	0,420	0,27	0,30	
279	LwK 4.8	53,53	3,780	2,42	2,73	
280	LwK 4.8	48,10	-1,650	-1,06	-1,19	
281	LwK 4.8	47,61	-2,140	-1,37	-1,54	
282	LwK 4.8	47,25	-2,500	-1,60	-1,80	
283	LwK 4.8	47,70	-2,050	-1,31	-1,48	
312	LwK 4.8	47,65	-2,100	-1,34	-1,51	
319	LwK 4.8	47,10	-2,650	-1,70	-1,91	
320	LwK 4.8	48,44	-1,310	-0,84	-0,95	
323	LwK 4.8	49,30	-0,450	-0,29	-0,32	
336	LwK 4.8	49,90	0,150	0,10	0,11	
337	LwK 4.8	49,80	0,050	0,03	0,04	
343	LwK 4.8	49,61	-0,140	-0,09	-0,10	
349	LwK 4.8	47,50	-2,250	-1,44	-1,62	
364	LwK 4.8	48,70	-1,050	-0,67	-0,76	

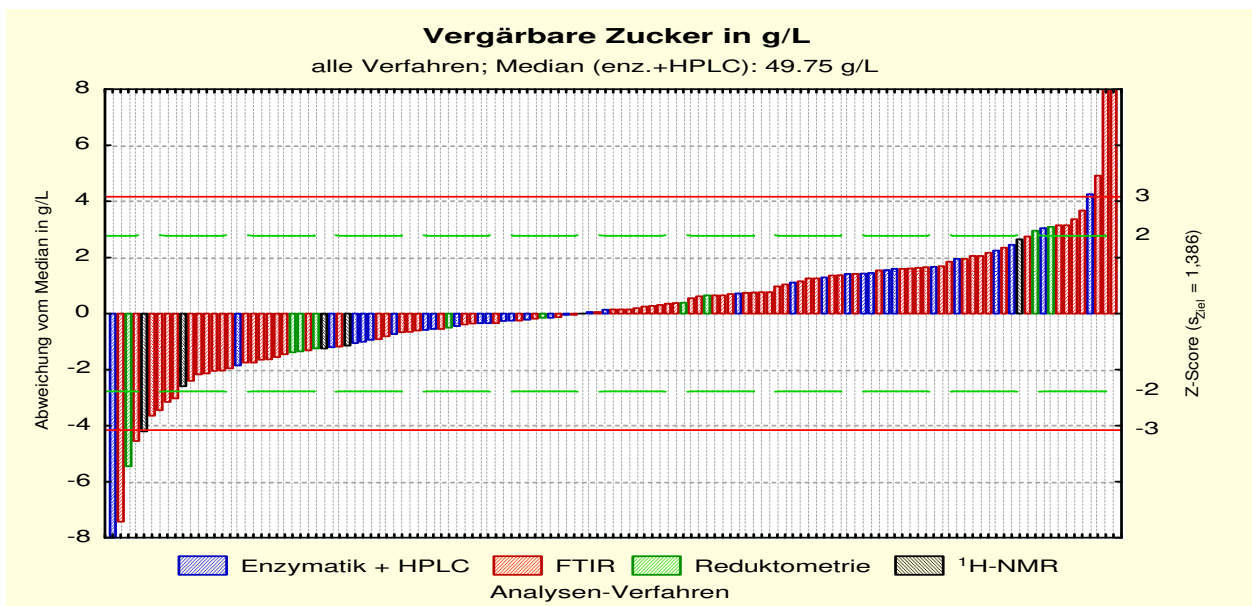
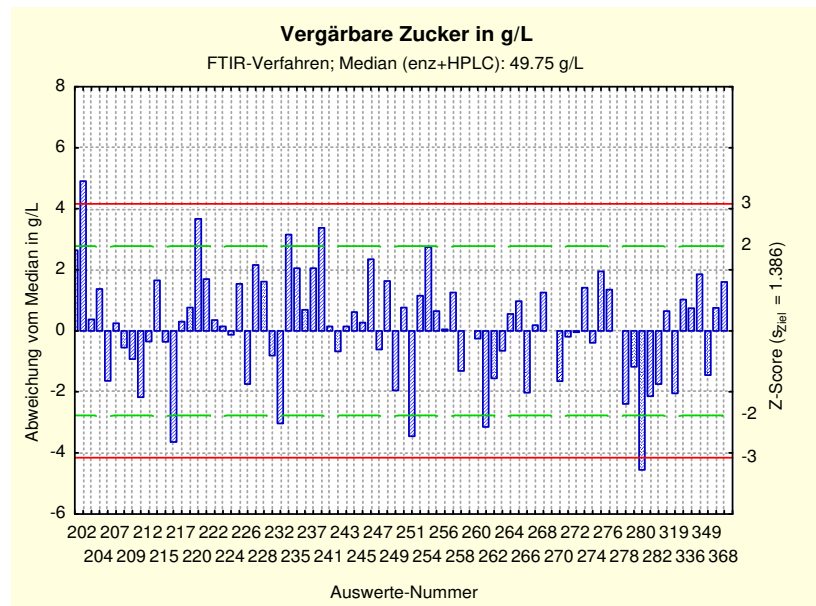
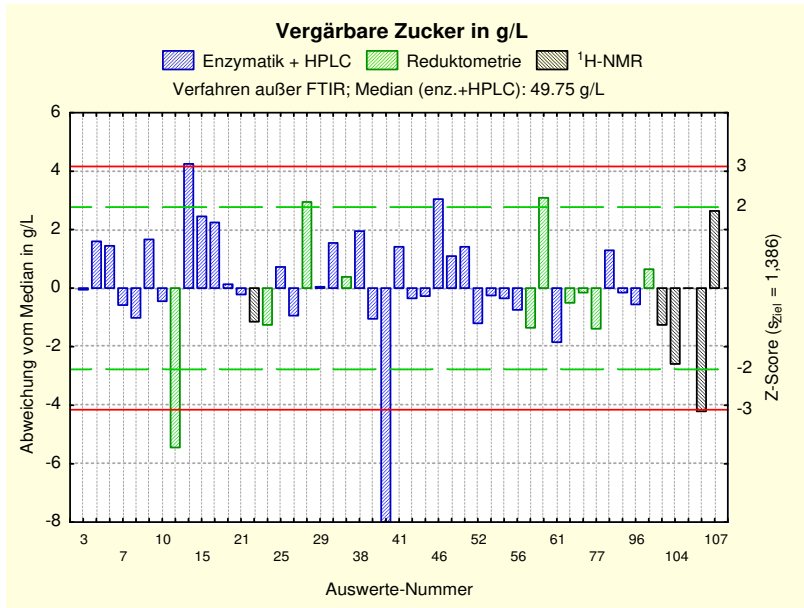
**4.4.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

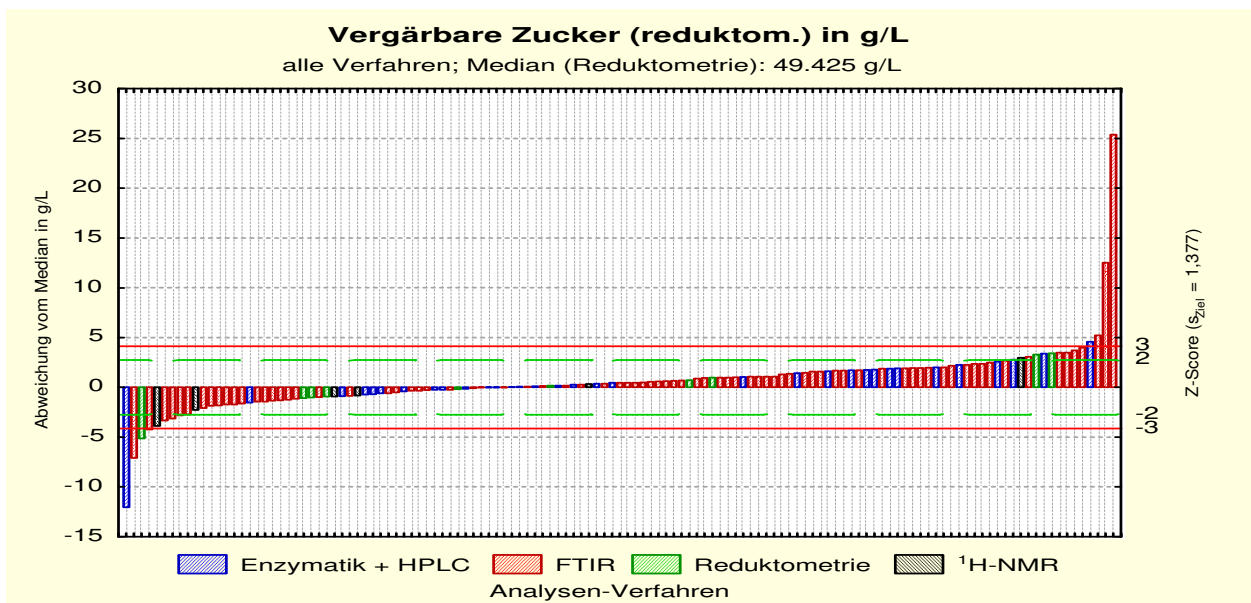
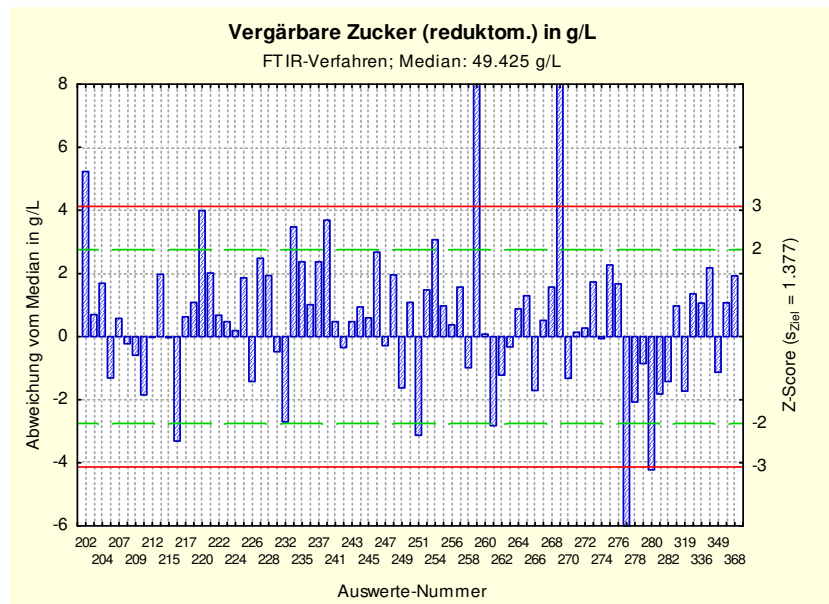
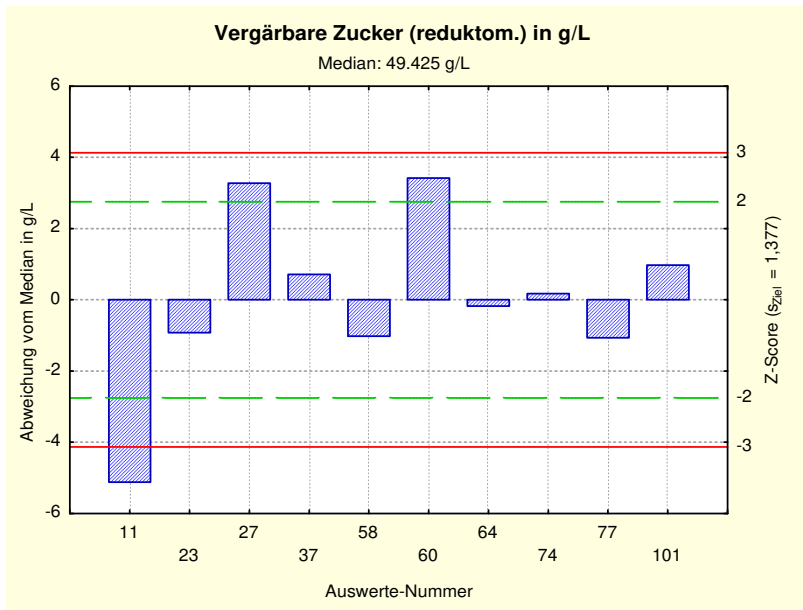
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch		reduktometrisch
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	33	32	10
Minimalwert	37,38	47,90	44,30
Mittelwert	49,870	50,260	49,449
Median	49,700	49,750	49,425
Maximalwert	54,00	54,00	52,84
Standardabweichung ( $s_L$ )	2,632	1,401	2,432
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,458	0,248	0,769
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	1,562	1,563	1,554
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	1,385	1,386	1,377
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	(0,584)	(0,584)	(0,584)
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,69	0,90	1,56
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,90	1,01	1,77
Quotient ( $s_L/\dot{U}\ FTIR$ )	(4,51)	(2,40)	(4,16)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,29	0,16	0,49
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,33	0,18	0,56
Quotient ( $u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	(0,78)	(0,42)	(1,32)

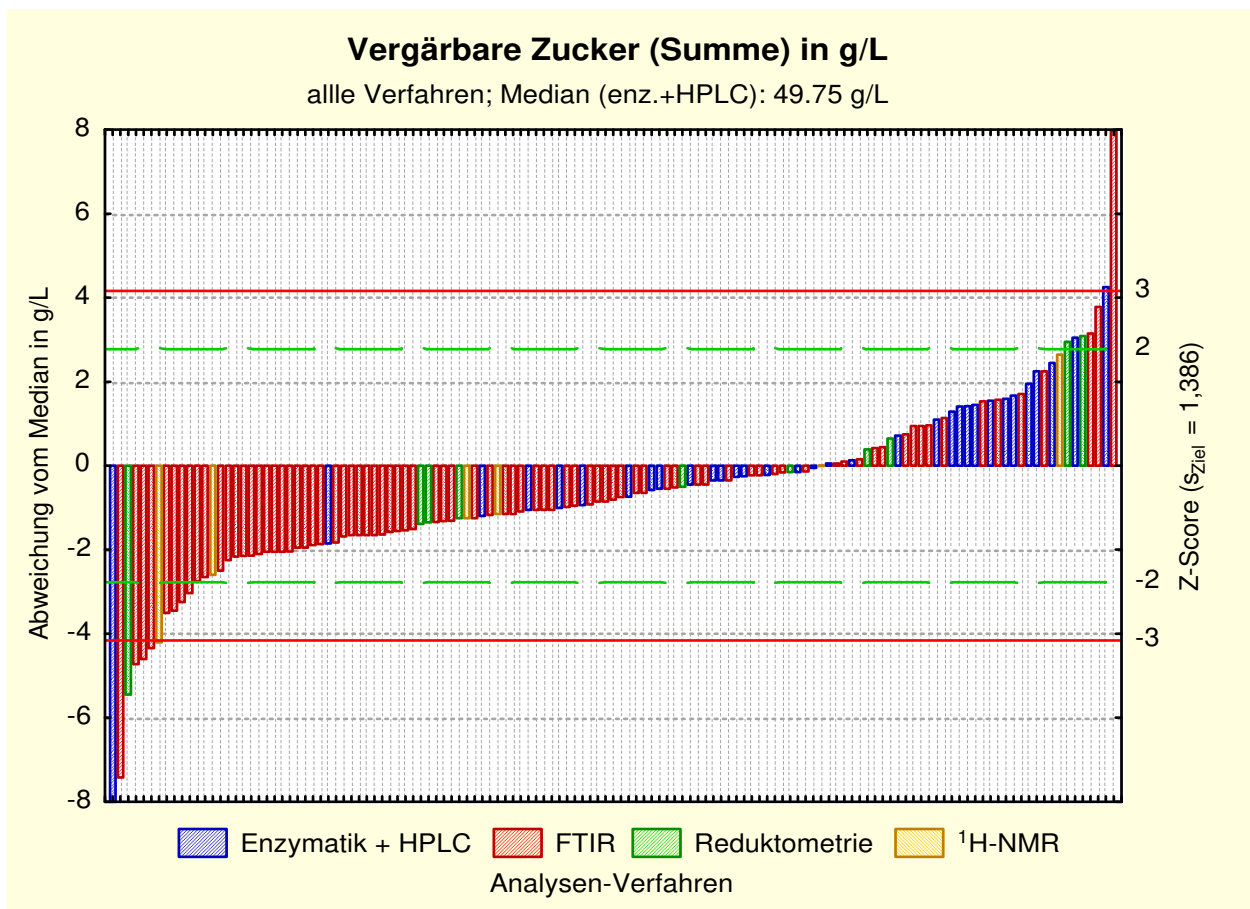
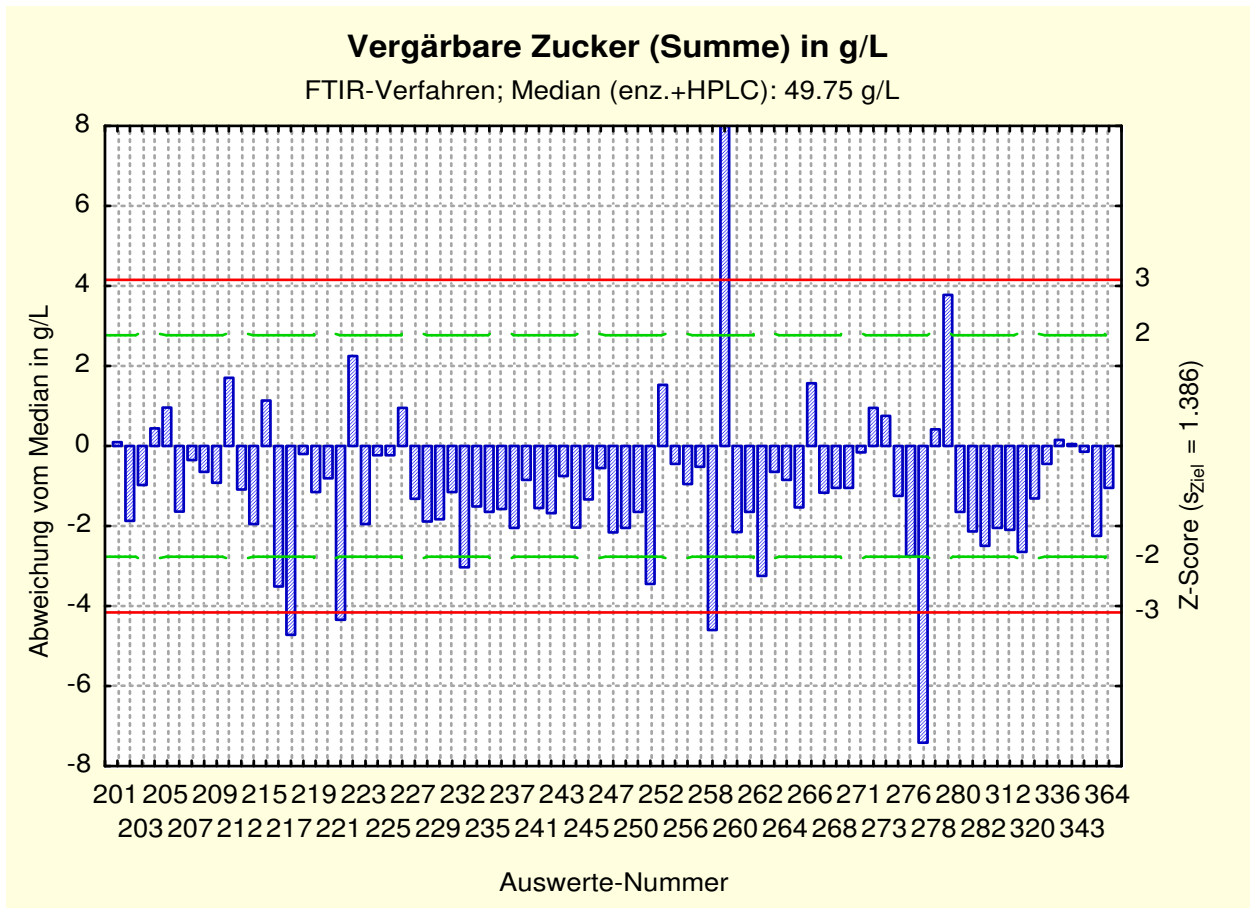
<sup>1)</sup> Die FTIR-Laborergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung  $s_{exp\ herk}$  bewertet.

**4.4.7 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	44,300	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	1	50,140	
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	8	49,974	2,029
	reduktometrische Verfahren	10	49,615	2,203
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	23	50,380	1,514
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	10	49,542	1,167
	enzymatische und HPLC-Verfahren	33	50,112	1,440
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker(r)	80	49,973	1,881
	Basis: Vergärbare Zucker(S)	82	48,671	1,407
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	48,654	2,555









## 4.5 Glucose [g/L]

### 4.5.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	9,31	-0,185	-0,48	-0,62	
03	enzymat., autom.	8,85	-0,645	-1,69	-2,16	
04	enzymat., autom.	9,79	0,290	0,76	0,97	
06	enzymat., autom.	9,66	0,165	0,43	0,55	
08	enzymat. Hand	9,35	-0,145	-0,38	-0,48	
09	enzymat. Hand	9,86	0,365	0,95	1,22	
10	enzymat., autom.	9,72	0,225	0,59	0,75	
11	enzymat., autom.	9,43	-0,065	-0,17	-0,22	
14	enzymat., autom.	9,47	-0,025	-0,07	-0,08	
15	enzymat., autom.	42,71	33,215	86,77	110,99	(*)
18	HPLC	8,98	-0,515	-1,35	-1,72	
20	HPLC	9,48	-0,015	-0,04	-0,05	
21	HPLC	9,34	-0,155	-0,40	-0,52	
22	NMR	9,56	0,065	0,17	0,22	
25	enzymat., autom.	9,81	0,315	0,82	1,05	
26	HPLC	9,75	0,252	0,66	0,84	
29	enzymat., autom.	9,17	-0,325	-0,85	-1,09	
31	enzymat., autom.	9,57	0,077	0,20	0,26	
38	enzymat., autom.	9,61	0,115	0,30	0,38	
39	HPLC	9,64	0,145	0,38	0,48	
40	enzymat., autom.	9,65	0,155	0,40	0,52	
41	enzymat., autom.	10,02	0,525	1,37	1,75	
42	HPLC	9,22	-0,271	-0,71	-0,91	
44	enzymat., autom.	9,16	-0,335	-0,88	-1,12	
48	enzymat., autom.	9,50	0,005	0,01	0,02	
50	HPLC	9,49	-0,005	-0,01	-0,02	
52	enzymat., autom.	9,45	-0,045	-0,12	-0,15	
53	enzymat., autom.	9,46	-0,035	-0,09	-0,12	
56	enzymat., autom.	9,38	-0,115	-0,30	-0,38	
58	enzymat., autom.	10,30	0,805	2,10	2,69	
61	HPLC	9,30	-0,195	-0,51	-0,65	
64	enzymat. Hand	9,70	0,201	0,53	0,67	
69	enzymat., autom.	9,56	0,070	0,18	0,23	
85	HPLC	10,13	0,635	1,66	2,12	
86	enzymat. Hand	9,54	0,045	0,12	0,15	
88	enzymat., autom.	9,79	0,295	0,77	0,99	
92	enzymat., autom.	9,26	-0,235	-0,61	-0,79	
94	HPLC	9,22	-0,275	-0,72	-0,92	
96	HPLC	9,30	-0,195	-0,51	-0,65	
101	enzymat. Hand	9,70	0,201	0,53	0,67	
103	NMR	9,70	0,205	0,54	0,69	
104	NMR	9,05	-0,450	-1,18	-1,50	
105	NMR	9,82	0,325	0,85	1,09	
106	NMR	9,03	-0,463	-1,21	-1,55	
107	NMR	9,84	0,349	0,91	1,17	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und bleibt unberücksichtigt.

### 4.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	8,79	-0,705	-1,84	-1,73	
202	FTIR	8,16	-1,335	-3,49	-3,27	
203	FTIR	9,70	0,205	0,54	0,50	
204	FTIR	8,77	-0,725	-1,89	-1,78	
205	FTIR	8,94	-0,555	-1,45	-1,36	
206	FTIR	10,17	0,675	1,76	1,65	
207	FTIR	9,30	-0,195	-0,51	-0,48	
208	FTIR	8,80	-0,695	-1,82	-1,70	
209	FTIR	10,33	0,835	2,18	2,05	
211	FTIR	8,92	-0,575	-1,50	-1,41	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
212	FTIR	8,52	-0,975	-2,55	-2,39	
214	FTIR	8,70	-0,795	-2,08	-1,95	
215	FTIR	8,67	-0,825	-2,16	-2,02	
216	FTIR	7,85	-1,645	-4,30	-4,03	
217	FTIR	7,95	-1,545	-4,04	-3,79	
218	FTIR	8,36	-1,135	-2,97	-2,78	
219	FTIR	10,40	0,905	2,36	2,22	
220	FTIR	8,26	-1,235	-3,23	-3,03	
221	FTIR	8,28	-1,215	-3,17	-2,98	
222	FTIR	10,60	1,105	2,89	2,71	
223	FTIR	8,60	-0,895	-2,34	-2,19	
224	FTIR	9,50	0,005	0,01	0,01	
225	FTIR	8,42	-1,075	-2,81	-2,63	
226	FTIR	9,80	0,305	0,80	0,75	
227	FTIR	8,61	-0,885	-2,31	-2,17	
228	FTIR	9,41	-0,085	-0,22	-0,21	
229	FTIR	8,58	-0,915	-2,39	-2,24	
231	FTIR	8,40	-1,095	-2,86	-2,68	
232	FTIR	8,34	-1,155	-3,02	-2,83	
234	FTIR	8,66	-0,835	-2,18	-2,05	
235	FTIR	8,60	-0,895	-2,34	-2,19	
236	FTIR	8,53	-0,965	-2,52	-2,37	
237	FTIR	10,20	0,705	1,84	1,73	
240	FTIR	8,11	-1,385	-3,62	-3,39	
241	FTIR	9,70	0,205	0,54	0,50	
242	FTIR	9,28	-0,215	-0,56	-0,53	
243	FTIR	9,30	-0,195	-0,51	-0,48	
244	FTIR	7,65	-1,845	-4,82	-4,52	
245	FTIR	9,44	-0,055	-0,14	-0,13	
246	FTIR	8,30	-1,195	-3,12	-2,93	
247	FTIR	8,34	-1,155	-3,02	-2,83	
249	FTIR	8,90	-0,595	-1,55	-1,46	
250	FTIR	7,95	-1,545	-4,04	-3,79	
251	FTIR	9,83	0,335	0,88	0,82	
252	FTIR	10,16	0,665	1,74	1,63	
254	FTIR	8,60	-0,895	-2,34	-2,19	
256	FTIR	9,10	-0,395	-1,03	-0,97	
257	FTIR	8,43	-1,065	-2,78	-2,61	
258	FTIR	7,43	-2,065	-5,39	-5,06	(**)
259	FTIR	19,88	10,385	27,13	25,45	(*)
260	FTIR	8,40	-1,095	-2,86	-2,68	
261	FTIR	8,90	-0,595	-1,55	-1,46	
262	FTIR	9,20	-0,295	-0,77	-0,72	
263	FTIR	10,80	1,305	3,41	3,20	
264	FTIR	8,50	-0,995	-2,60	-2,44	
265	FTIR	9,44	-0,055	-0,14	-0,13	
266	FTIR	9,81	0,315	0,82	0,77	
267	FTIR	10,53	1,035	2,70	2,54	
268	FTIR	8,55	-0,945	-2,47	-2,32	
270	FTIR	9,20	-0,295	-0,77	-0,72	
271	FTIR	9,22	-0,275	-0,72	-0,67	
272	FTIR	9,00	-0,495	-1,29	-1,21	
273	FTIR	8,60	-0,895	-2,34	-2,19	
275	FTIR	9,40	-0,095	-0,25	-0,23	
276	FTIR	8,50	-0,995	-2,60	-2,44	
277	FTIR	8,36	-1,135	-2,97	-2,78	
278	FTIR	9,81	0,315	0,82	0,77	
279	FTIR	9,60	0,105	0,27	0,26	
280	FTIR	8,70	-0,795	-2,08	-1,95	
281	FTIR	9,55	0,055	0,14	0,13	
282	FTIR	8,09	-1,405	-3,67	-3,44	
283	FTIR	7,70	-1,795	-4,69	-4,40	
312	FTIR	7,39	-2,105	-5,50	-5,16	(**)
319	FTIR	8,70	-0,795	-2,08	-1,95	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

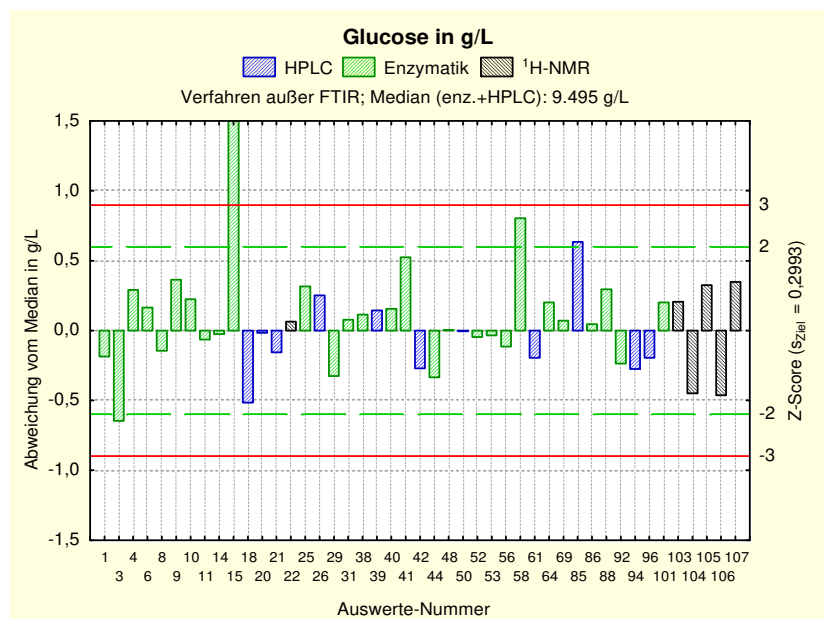
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
320	FTIR	8,64	-0,855	-2,23	-2,10	
323	FTIR	9,00	-0,495	-1,29	-1,21	
336	FTIR	10,10	0,605	1,58	1,48	
337	FTIR	9,50	0,005	0,01	0,01	
343	FTIR	9,26	-0,235	-0,61	-0,58	
349	FTIR	8,70	-0,795	-2,08	-1,95	
364	FTIR	8,10	-1,395	-3,64	-3,42	

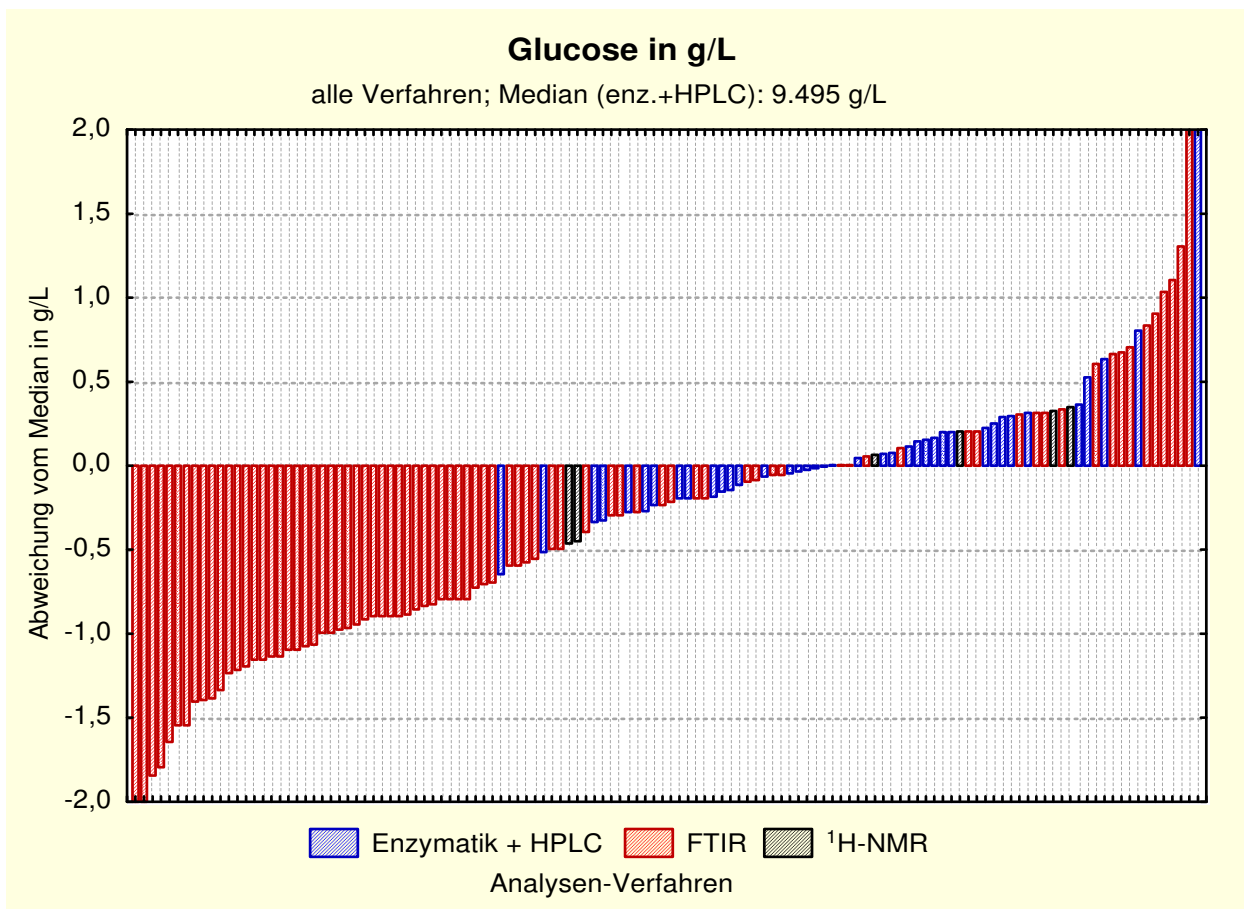
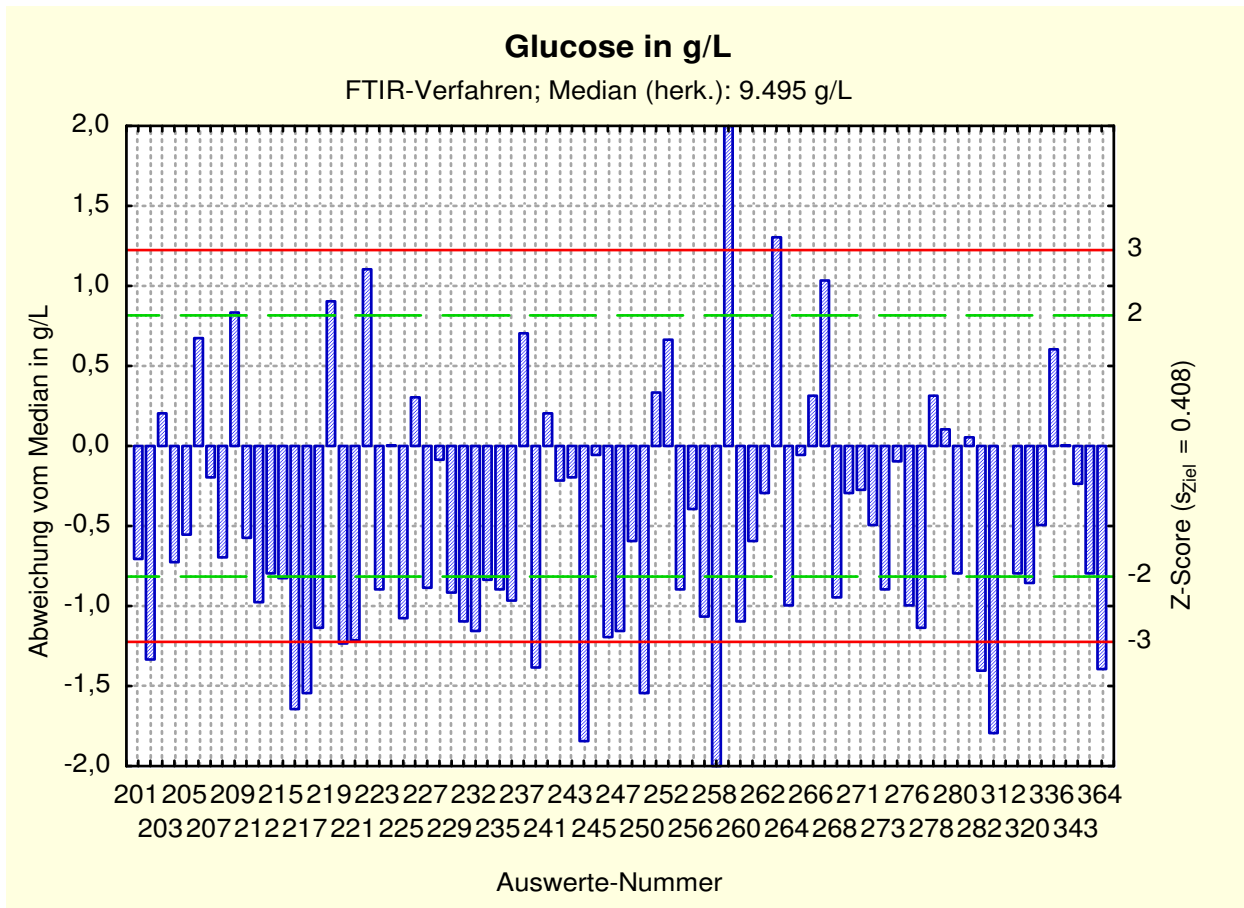
**4.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	38
Minimalwert	8,85
Mittelwert	9,524
Median	9,495
Maximalwert	10,30
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,297
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,048
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,383
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,299
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,408
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,78
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,99
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,73
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,13
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,16
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,12

**4.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	11	9,415	0,289
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	22	9,577	0,303
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, manuell	6	9,575	0,245
	herkömmliche Verfahren	39	9,529	0,286
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	81	8,933	0,785
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	9,523	0,386





## 4.6 Fructose [g/L]

### 4.6.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	43,68	3,280	2,50	2,89	
03	enzymat., autom.	40,85	0,450	0,34	0,40	
04	enzymat., autom.	41,56	1,160	0,89	1,02	
06	enzymat., autom.	41,60	1,200	0,92	1,06	
08	enzymat. Hand	39,39	-1,010	-0,77	-0,89	
09	enzymat. Hand	41,56	1,160	0,89	1,02	
10	enzymat., autom.	39,50	-0,900	-0,69	-0,79	
11	enzymat., autom.	35,29	-5,110	-3,90	-4,51	
14	enzymat., autom.	44,55	4,150	3,17	3,66	
15	enzymat., autom.	9,46	-30,940	-23,62	-27,29	(*)
18	HPLC	42,97	2,570	1,96	2,27	
20	HPLC	40,40	0,000	0,00	0,00	
21	HPLC	40,19	-0,210	-0,16	-0,19	
22	NMR	39,08	-1,320	-1,01	-1,16	
25	enzymat., autom.	40,66	0,260	0,20	0,23	
26	HPLC	39,06	-1,337	-1,02	-1,18	
29	enzymat., autom.	40,23	-0,170	-0,13	-0,15	
31	enzymat., autom.	41,74	1,342	1,02	1,18	
38	enzymat., autom.	42,10	1,700	1,30	1,50	
39	HPLC	39,03	-1,370	-1,05	-1,21	
40	enzymat., autom.	37,73	-2,670	-2,04	-2,36	
41	enzymat., autom.	41,14	0,740	0,57	0,65	
42	HPLC	40,16	-0,245	-0,19	-0,22	
44	enzymat., autom.	40,32	-0,080	-0,06	-0,07	
48	enzymat., autom.	41,05	0,650	0,50	0,57	
50	HPLC	41,68	1,280	0,98	1,13	
52	enzymat., autom.	39,07	-1,330	-1,02	-1,17	
53	enzymat., autom.	40,07	-0,330	-0,25	-0,29	
56	enzymat., autom.	39,63	-0,770	-0,59	-0,68	
58	enzymat., autom.	38,00	-2,400	-1,83	-2,12	
61	HPLC	38,60	-1,800	-1,37	-1,59	
64	enzymat. Hand	39,78	-0,622	-0,47	-0,55	
69	enzymat., autom.	41,06	0,659	0,50	0,58	
85	HPLC	41,38	0,980	0,75	0,86	
86	enzymat. Hand	40,48	0,080	0,06	0,07	
88	enzymat., autom.	43,77	3,370	2,57	2,97	
92	enzymat., autom.	41,78	1,380	1,05	1,22	
94	HPLC	40,20	-0,200	-0,15	-0,18	
101	enzymat. Hand	39,84	-0,561	-0,43	-0,49	
103	NMR	38,80	-1,600	-1,22	-1,41	
104	NMR	38,11	-2,291	-1,75	-2,02	
105	NMR	39,92	-0,480	-0,37	-0,42	
106	NMR	36,51	-3,886	-2,97	-3,43	
107	NMR	42,55	2,150	1,64	1,90	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und bleibt unberücksichtigt.

### 4.6.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	41,06	0,660	0,50	0,58	
202	FTIR	39,72	-0,680	-0,52	-0,60	
203	FTIR	39,07	-1,330	-1,02	-1,17	
204	FTIR	41,42	1,021	0,78	0,90	
205	FTIR	41,77	1,370	1,05	1,21	
206	FTIR	37,94	-2,460	-1,88	-2,17	
207	FTIR	40,10	-0,300	-0,23	-0,26	
208	FTIR	40,30	-0,100	-0,08	-0,09	
209	FTIR	38,50	-1,900	-1,45	-1,68	
211	FTIR	42,54	2,140	1,63	1,89	
212	FTIR	40,14	-0,260	-0,20	-0,23	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
214	FTIR	39,10	-1,300	-0,99	-1,15	
215	FTIR	42,22	1,820	1,39	1,61	
216	FTIR	38,39	-2,010	-1,53	-1,77	
217	FTIR	37,08	-3,320	-2,53	-2,93	
218	FTIR	41,19	0,790	0,60	0,70	
219	FTIR	38,20	-2,200	-1,68	-1,94	
220	FTIR	40,68	0,280	0,21	0,25	
221	FTIR	37,13	-3,270	-2,50	-2,88	
222	FTIR	41,40	1,000	0,76	0,88	
223	FTIR	39,20	-1,200	-0,92	-1,06	
224	FTIR	40,02	-0,380	-0,29	-0,34	
225	FTIR	41,10	0,700	0,53	0,62	
226	FTIR	40,90	0,500	0,38	0,44	
227	FTIR	39,82	-0,580	-0,44	-0,51	
228	FTIR	38,45	-1,950	-1,49	-1,72	
229	FTIR	39,34	-1,060	-0,81	-0,93	
231	FTIR	40,20	-0,200	-0,15	-0,18	
232	FTIR	38,38	-2,020	-1,54	-1,78	
234	FTIR	39,58	-0,820	-0,63	-0,72	
235	FTIR	39,50	-0,900	-0,69	-0,79	
236	FTIR	39,64	-0,760	-0,58	-0,67	
237	FTIR	37,50	-2,900	-2,21	-2,56	
240	FTIR	40,79	0,390	0,30	0,34	
241	FTIR	38,50	-1,900	-1,45	-1,68	
242	FTIR	38,79	-1,610	-1,23	-1,42	
243	FTIR	39,70	-0,700	-0,53	-0,62	
244	FTIR	40,06	-0,340	-0,26	-0,30	
245	FTIR	38,97	-1,430	-1,09	-1,26	
246	FTIR	40,90	0,500	0,38	0,44	
247	FTIR	39,25	-1,150	-0,88	-1,01	
249	FTIR	38,80	-1,600	-1,22	-1,41	
250	FTIR	40,15	-0,250	-0,19	-0,22	
251	FTIR	36,47	-3,930	-3,00	-3,47	
252	FTIR	41,12	0,720	0,55	0,64	
254	FTIR	40,70	0,300	0,23	0,26	
256	FTIR	39,70	-0,700	-0,53	-0,62	
257	FTIR	40,80	0,400	0,31	0,35	
258	FTIR	37,72	-2,680	-2,05	-2,36	
259	FTIR	40,29	-0,110	-0,08	-0,10	
260	FTIR	39,20	-1,200	-0,92	-1,06	
261	FTIR	39,20	-1,200	-0,92	-1,06	
262	FTIR	37,30	-3,100	-2,37	-2,73	
263	FTIR	38,30	-2,100	-1,60	-1,85	
264	FTIR	40,40	0,000	0,00	0,00	
265	FTIR	38,77	-1,630	-1,24	-1,44	
266	FTIR	41,51	1,110	0,85	0,98	
267	FTIR	38,05	-2,350	-1,79	-2,07	
268	FTIR	40,15	-0,250	-0,19	-0,22	
270	FTIR	39,50	-0,900	-0,69	-0,79	
271	FTIR	40,37	-0,030	-0,02	-0,03	
272	FTIR	41,70	1,300	0,99	1,15	
273	FTIR	41,90	1,500	1,15	1,32	
275	FTIR	39,10	-1,300	-0,99	-1,15	
276	FTIR	38,50	-1,900	-1,45	-1,68	
277	FTIR	33,97	-6,430	-4,91	-5,67	(**)
278	FTIR	40,36	-0,040	-0,03	-0,04	
279	FTIR	43,93	3,530	2,70	3,11	
280	FTIR	39,40	-1,000	-0,76	-0,88	
281	FTIR	38,06	-2,340	-1,79	-2,06	
282	FTIR	39,16	-1,240	-0,95	-1,09	
283	FTIR	40,00	-0,400	-0,31	-0,35	
312	FTIR	40,26	-0,140	-0,11	-0,12	
319	FTIR	38,40	-2,000	-1,53	-1,76	
320	FTIR	39,80	-0,600	-0,46	-0,53	
323	FTIR	40,30	-0,100	-0,08	-0,09	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
336	FTIR	39,80	-0,600	-0,46	-0,53	
337	FTIR	40,30	-0,100	-0,08	-0,09	
343	FTIR	40,35	-0,050	-0,04	-0,04	
349	FTIR	38,80	-1,600	-1,22	-1,41	
364	FTIR	40,60	0,200	0,15	0,18	

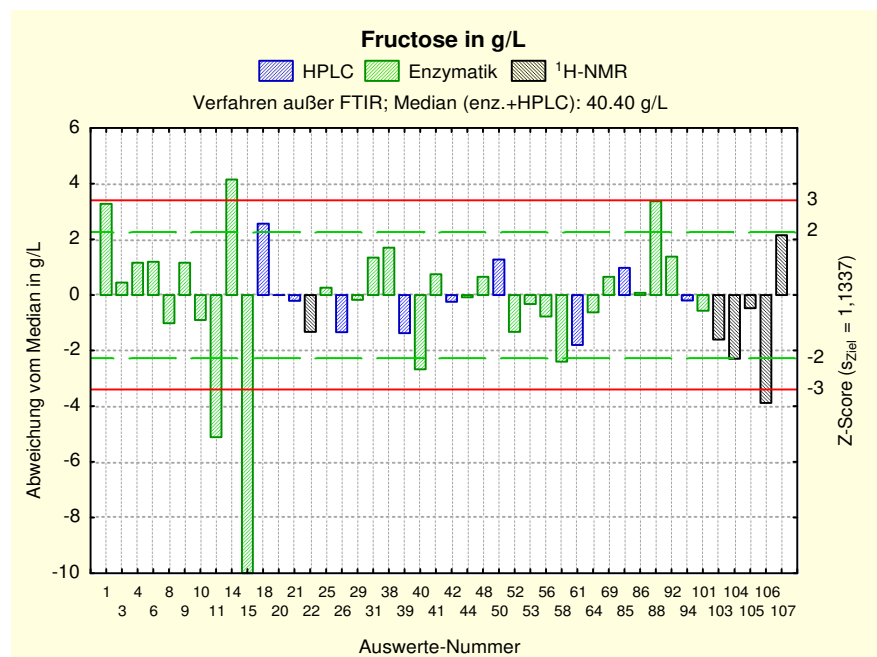
**4.6.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

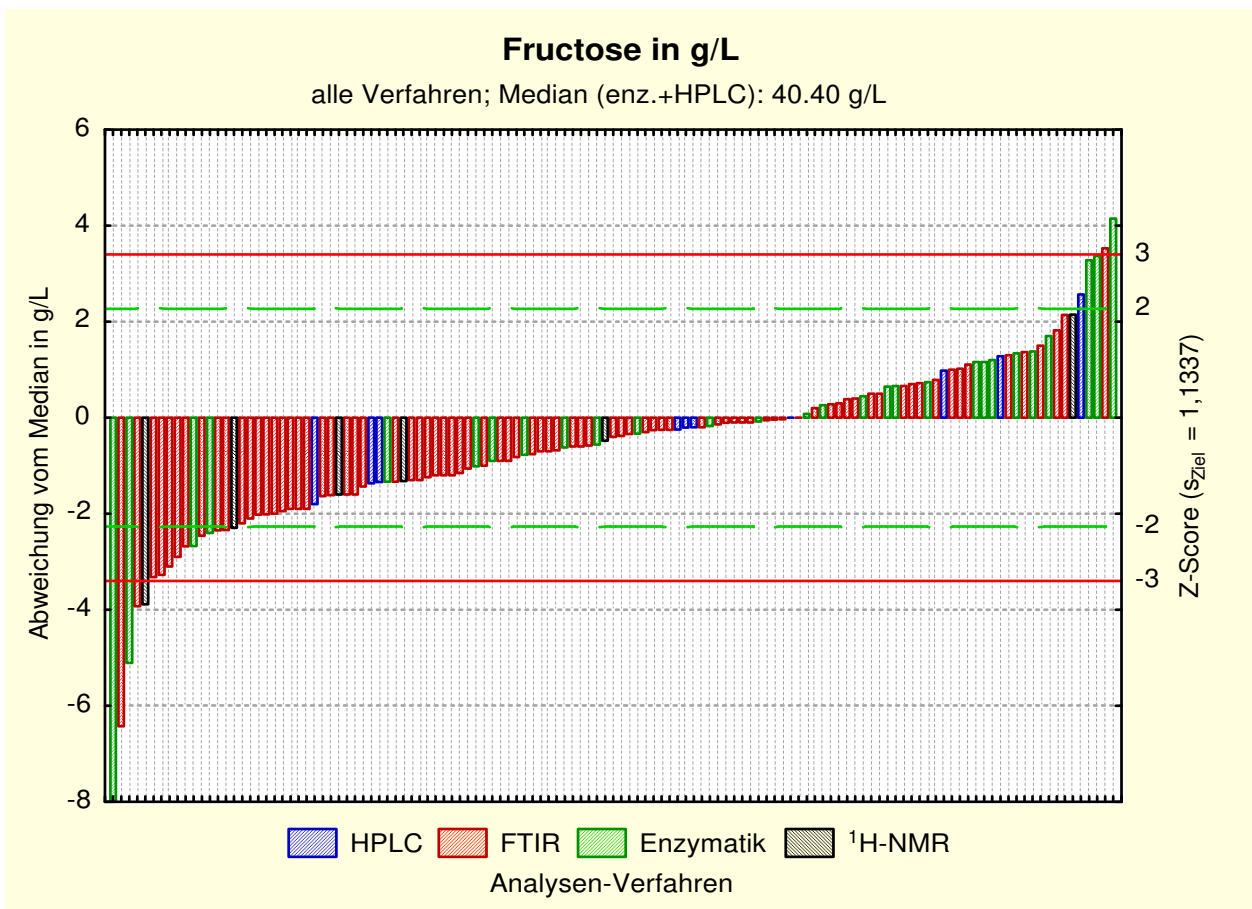
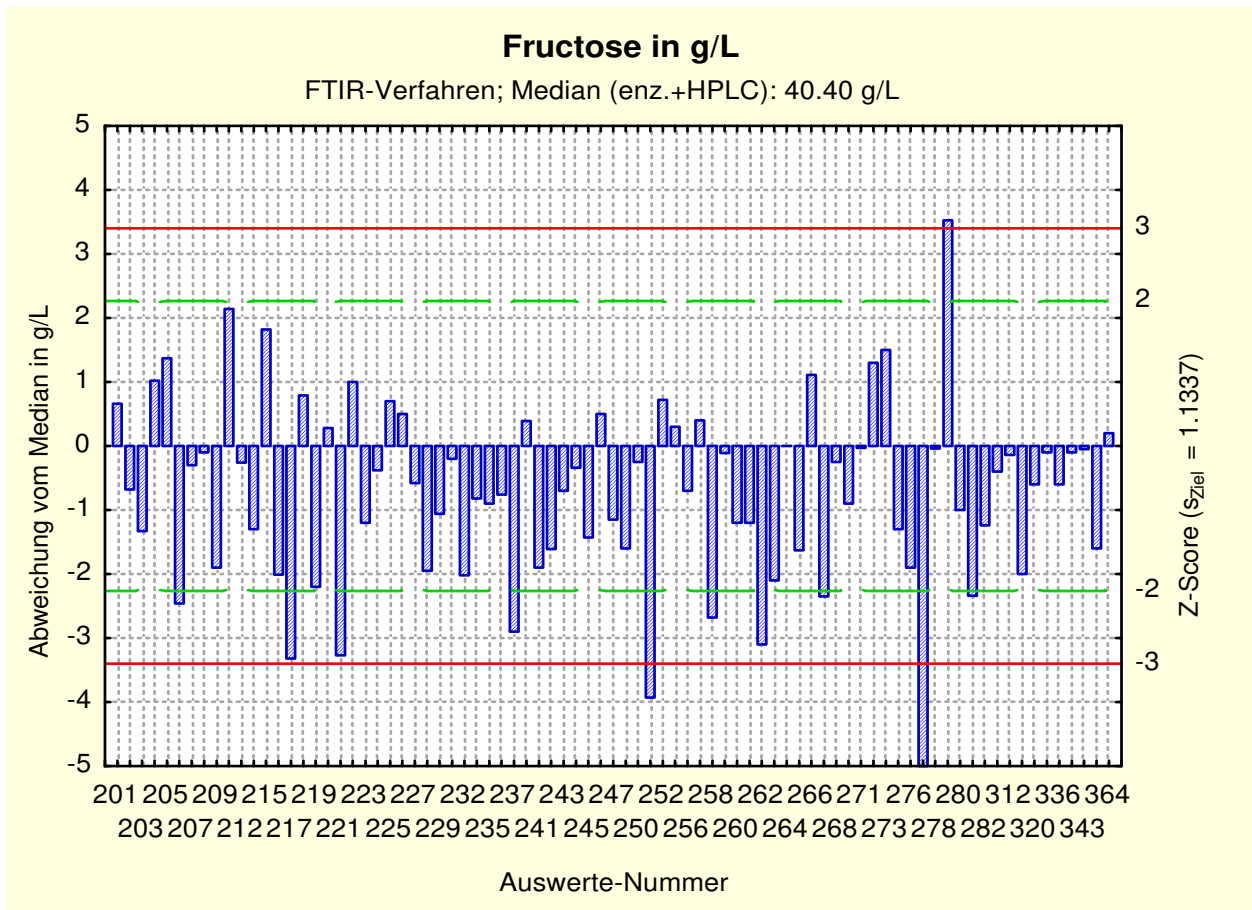
Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	37
Minimalwert	35,29
Mittelwert	40,543
Median	40,400
Maximalwert	44,55
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	1,758
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,289
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	1,310
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	1,134
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	(0,330)
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,34
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,55
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	(5,33)
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,22
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,25
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	(0,88)

<sup>1)</sup> Die FTIR-Laboregebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung s<sub>exp herk</sub> bewertet.

**4.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	10	40,310	1,392
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02; enzymatisch, automatisiert	22	40,460	1,894
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, manuell	6	40,626	1,470
	herkömmliche Verfahren	38	40,470	1,584
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	81	39,684	1,352
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	39,170	2,256







## 4.7 Glycerin [g/L]

### 4.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	5,72	0,13	0,55	
03	enzymat. Hand	5,21	-0,38	-1,54	
04	enzymat. autom.	5,54	-0,05	-0,21	
06	enzymat. autom.	5,74	0,15	0,63	
07	enzymat. autom.	5,49	-0,10	-0,39	
08	enzymat. Hand	5,53	-0,06	-0,23	
10	enzymat. autom.	6,50	0,91	3,75	
11	enzymat. Hand	5,46	-0,13	-0,51	
20	HPLC	5,52	-0,07	-0,27	
21	HPLC	5,47	-0,12	-0,47	
22	NMR	5,74	0,15	0,63	
26	HPLC	5,67	0,08	0,33	
39	HPLC	5,30	-0,29	-1,17	
42	HPLC	5,51	-0,08	-0,31	
44	enzymat. autom.	5,67	0,08	0,35	
48	HPLC	5,57	-0,01	-0,06	
50	HPLC	5,67	0,08	0,35	
56	enzymat. autom.	5,65	0,06	0,26	
58	enzymat. autom.	5,40	-0,19	-0,76	
61	HPLC	5,60	0,01	0,06	
85	HPLC	5,67	0,08	0,35	
86	enzymat. Hand	5,36	-0,23	-0,92	
88	enzymat. autom.	5,89	0,30	1,24	
89	enzymat. Hand	5,66	0,07	0,31	
94	HPLC	5,60	0,01	0,06	
103	NMR	6,80	1,21	4,98	
104	NMR	5,69	0,11	0,44	
105	NMR	6,57	0,98	4,04	
106	NMR	6,41	0,82	3,36	
107	NMR	6,85	1,27	5,19	(**)

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

### 4.7.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	5,77	0,18	0,76	0,53	
202	FTIR	4,98	-0,61	-2,48	-1,74	
203	FTIR	5,94	0,35	1,45	1,02	
204	FTIR	5,66	0,08	0,31	0,22	
206	FTIR	5,07	-0,52	-2,11	-1,48	
207	FTIR	5,86	0,27	1,13	0,79	
208	FTIR	7,40	1,81	7,44	5,21	(**)
209	FTIR	6,58	0,99	4,08	2,86	
211	FTIR	6,21	0,62	2,56	1,79	
212	FTIR	5,87	0,28	1,17	0,82	
214	FTIR	5,30	-0,29	-1,17	-0,82	
215	FTIR	7,47	1,89	7,74	5,42	(**)
216	FTIR	8,10	2,51	10,31	7,23	(**)
217	FTIR	5,80	0,21	0,88	0,62	
218	FTIR	7,30	1,71	7,03	4,93	
219	FTIR	8,00	2,41	9,90	6,94	(**)
220	FTIR	5,83	0,24	1,00	0,70	
221	FTIR	6,11	0,52	2,15	1,51	
222	FTIR	6,00	0,41	1,70	1,19	
223	FTIR	5,10	-0,49	-1,99	-1,40	
224	FTIR	5,10	-0,49	-1,99	-1,40	
225	FTIR	5,34	-0,25	-1,01	-0,71	
226	FTIR	5,30	-0,29	-1,17	-0,82	
227	FTIR	5,78	0,19	0,80	0,56	
228	FTIR	5,59	0,00	0,02	0,01	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
229	FTIR	5,76	0,17	0,72	0,50	
231	FTIR	4,74	-0,85	-3,47	-2,43	
232	FTIR	5,00	-0,59	-2,40	-1,68	
234	FTIR	5,42	-0,17	-0,68	-0,48	
235	FTIR	5,40	-0,19	-0,76	-0,53	
236	FTIR	4,37	-1,22	-4,98	-3,49	
237	FTIR	8,20	2,61	10,72	7,51	(**)
240	FTIR	5,60	0,01	0,06	0,04	
241	FTIR	5,80	0,21	0,88	0,62	
242	FTIR	5,29	-0,30	-1,21	-0,85	
243	FTIR	5,70	0,11	0,47	0,33	
244	FTIR	5,80	0,21	0,88	0,62	
245	FTIR	4,92	-0,67	-2,73	-1,91	
246	FTIR	5,40	-0,19	-0,76	-0,53	
249	FTIR	7,80	2,21	9,08	6,36	(**)
250	FTIR	5,81	0,22	0,92	0,65	
252	FTIR	4,95	-0,64	-2,61	-1,83	
254	FTIR	5,50	-0,09	-0,35	-0,25	
256	FTIR	6,30	0,71	2,93	2,05	
257	FTIR	5,56	-0,03	-0,10	-0,07	
258	FTIR	7,65	2,06	8,46	5,93	(**)
259	FTIR	6,04	0,45	1,86	1,31	
260	FTIR	5,60	0,01	0,06	0,04	
261	FTIR	6,90	1,31	5,39	3,78	
262	FTIR	8,40	2,81	11,54	8,09	(*)
263	FTIR	4,70	-0,89	-3,63	-2,54	
265	FTIR	6,09	0,50	2,07	1,45	
266	FTIR	5,10	-0,49	-1,99	-1,40	
267	FTIR	4,30	-1,29	-5,27	-3,69	
271	FTIR	4,47	-1,12	-4,57	-3,21	
272	FTIR	4,60	-0,99	-4,04	-2,83	
273	FTIR	5,66	0,07	0,31	0,21	
275	FTIR	5,00	-0,59	-2,40	-1,68	
276	FTIR	5,70	0,11	0,47	0,33	
278	FTIR	5,41	-0,18	-0,72	-0,50	
279	FTIR	5,50	-0,09	-0,35	-0,25	
280	FTIR	4,20	-1,39	-5,68	-3,98	
281	FTIR	5,25	-0,34	-1,38	-0,96	
282	FTIR	5,32	-0,27	-1,09	-0,76	
283	FTIR	4,50	-1,09	-4,45	-3,12	
320	FTIR	5,75	0,16	0,67	0,47	
336	FTIR	4,43	-1,16	-4,74	-3,32	
337	FTIR	4,90	-0,69	-2,81	-1,97	
349	FTIR	6,50	0,91	3,75	2,63	
368	FTIR	7,25	1,66	6,82	4,78	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom herkömmlichen Bezugswert ab.

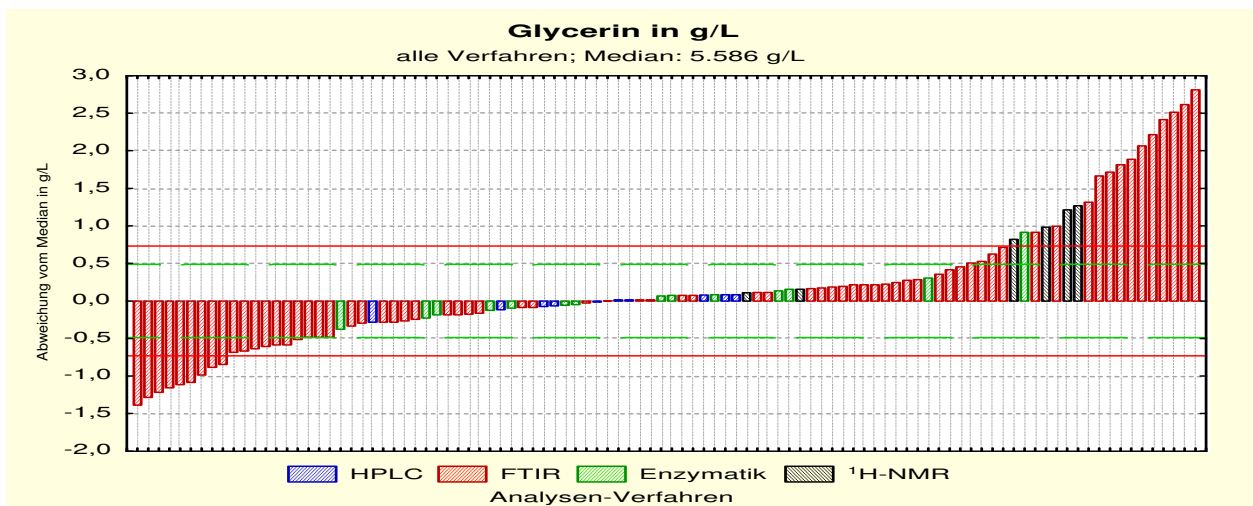
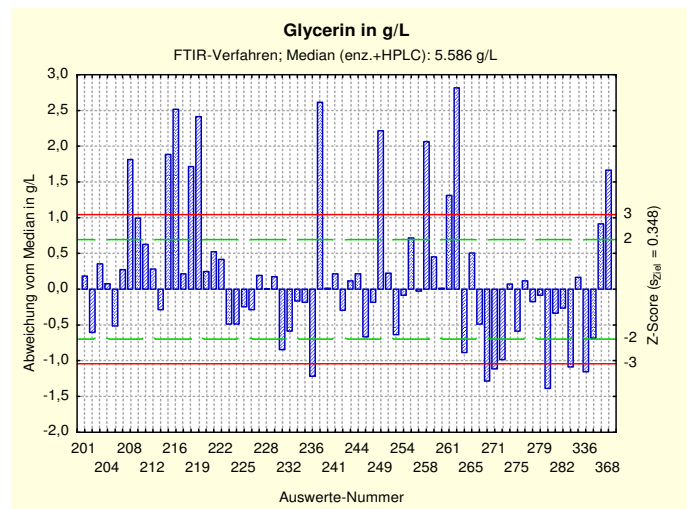
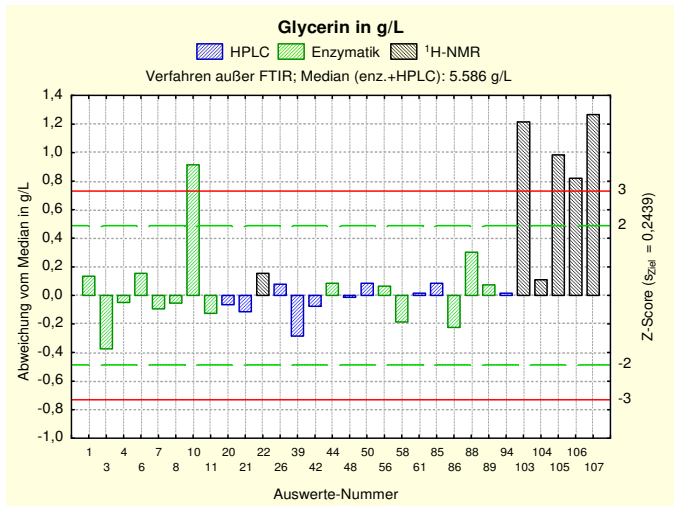
(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert ab.

**4.7.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	24
Minimalwert	5,2
Mittelwert	5,60
Median	5,59
Maximalwert	6,5
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,244
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,050
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,244
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{U\text{ FTIR}}$ )	0,348
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,00
Quotient ( $s_L/s_{U\text{ FTIR}}$ )	0,70
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,20
Quotient ( $u_M/s_{U\text{ FTIR}}$ )	0,14

4.7.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	10	5,569	0,100
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	8	5,676	0,238
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	6	5,490	0,215
	herkömmliche Verfahren	24	5,575	0,155
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	70	5,656	0,837
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	6,351	0,568



## 4.8 pH-Wert

### 4.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
01	potentiometr.	3,43	-0,020	-0,42	
03	potentiometr.	3,32	-0,130	-2,73	
04	potentiometr.	3,40	-0,050	-1,05	
05	potentiometr.	3,47	0,020	0,42	
06	potentiometr.	3,44	-0,010	-0,21	
07	potentiometr.	3,46	0,010	0,21	
08	potentiometr.	3,51	0,060	1,26	
09	potentiometr.	3,48	0,030	0,63	
10	potentiometr.	3,47	0,020	0,42	
11	potentiometr.	3,47	0,020	0,42	
14	potentiometr.	3,45	0,000	0,00	
15	potentiometr.	3,41	-0,040	-0,84	
18	potentiometr.	3,48	0,034	0,71	
20	potentiometr.	3,45	0,000	0,00	
21	potentiometr.	3,40	-0,050	-1,05	
22	potentiometr.	3,37	-0,080	-1,68	
25	potentiometr.	3,37	-0,080	-1,68	
26	potentiometr.	3,42	-0,030	-0,63	
27	potentiometr.	3,61	0,160	3,36	
29	potentiometr.	3,44	-0,010	-0,21	
37	potentiometr.	3,34	-0,110	-2,31	
38	potentiometr.	3,45	0,000	0,00	
39	potentiometr.	3,41	-0,040	-0,84	
40	potentiometr.	3,46	0,005	0,11	
41	potentiometr.	3,44	-0,010	-0,21	
42	potentiometr.	3,71	0,260	5,46	(**)
44	potentiometr.	3,34	-0,110	-2,31	
46	potentiometr.	3,48	0,030	0,63	
48	potentiometr.	3,37	-0,080	-1,68	
50	potentiometr.	3,46	0,010	0,21	
53	potentiometr.	3,47	0,020	0,42	
56	potentiometr.	3,47	0,020	0,42	
58	potentiometr.	3,48	0,030	0,63	
60	potentiometr.	3,41	-0,040	-0,84	
61	potentiometr.	3,18	-0,270	-5,67	(**)
64	potentiometr.	3,33	-0,120	-2,52	
69	potentiometr.	3,42	-0,030	-0,63	
74	potentiometr.	3,43	-0,020	-0,42	
77	potentiometr.	3,47	0,020	0,42	
86	potentiometr.	3,48	0,030	0,63	
88	potentiometr.	3,47	0,020	0,42	
101	potentiometr.	3,33	-0,120	-2,52	
102	potentiometr.	3,46	0,010	0,21	

(\*\*) Diese Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

### 4.8.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
elektrom.	elektrometrisch	43	3,435	0,0552
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	81	3,446	0,0843

**4.8.3 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,39	-0,060	-1,22	
202	FTIR	3,48	0,030	0,61	
203	FTIR	3,49	0,040	0,81	
204	FTIR	3,39	-0,061	-1,24	
205	FTIR	3,47	0,020	0,41	
206	FTIR	3,45	0,000	0,00	
207	FTIR	3,51	0,060	1,22	
208	FTIR	3,39	-0,060	-1,22	
209	FTIR	3,45	0,000	0,00	
211	FTIR	3,37	-0,080	-1,62	
212	FTIR	3,41	-0,040	-0,81	
214	FTIR	3,44	-0,010	-0,20	
215	FTIR	3,53	0,080	1,62	
216	FTIR	3,57	0,120	2,43	
217	FTIR	3,40	-0,050	-1,01	
218	FTIR	3,41	-0,040	-0,81	
219	FTIR	3,57	0,120	2,43	
220	FTIR	3,43	-0,020	-0,41	
221	FTIR	3,45	0,000	0,00	
222	FTIR	3,35	-0,100	-2,03	
223	FTIR	3,47	0,020	0,41	
224	FTIR	3,49	0,040	0,81	
225	FTIR	3,37	-0,080	-1,62	
226	FTIR	3,50	0,050	1,01	
227	FTIR	3,45	0,000	0,00	
228	FTIR	3,55	0,100	2,03	
229	FTIR	3,40	-0,050	-1,01	
231	FTIR	3,43	-0,020	-0,41	
232	FTIR	3,42	-0,030	-0,61	
234	FTIR	3,47	0,020	0,41	
235	FTIR	3,71	0,260	5,27	(**)
236	FTIR	3,47	0,020	0,41	
237	FTIR	3,54	0,090	1,83	
240	FTIR	3,46	0,010	0,20	
241	FTIR	3,49	0,040	0,81	
242	FTIR	3,44	-0,010	-0,20	
243	FTIR	3,45	0,000	0,00	
244	FTIR	3,25	-0,200	-4,06	
245	FTIR	3,39	-0,060	-1,22	
246	FTIR	3,45	0,000	0,00	
247	FTIR	3,40	-0,050	-1,01	
248	FTIR	3,34	-0,110	-2,23	
249	FTIR	3,43	-0,020	-0,41	
250	FTIR	3,49	0,040	0,81	
251	FTIR	3,44	-0,010	-0,20	
252	FTIR	3,47	0,020	0,41	
254	FTIR	3,46	0,010	0,20	
256	FTIR	3,51	0,060	1,22	
257	FTIR	3,46	0,010	0,20	
258	FTIR	3,35	-0,100	-2,03	
259	FTIR	3,31	-0,140	-2,84	
260	FTIR	3,56	0,110	2,23	
261	FTIR	3,20	-0,250	-5,07	(**)
262	FTIR	3,56	0,110	2,23	
263	FTIR	3,48	0,030	0,61	
264	FTIR	3,36	-0,090	-1,83	
265	FTIR	3,45	0,000	0,00	
266	FTIR	3,40	-0,050	-1,01	
267	FTIR	3,49	0,040	0,81	
268	FTIR	3,43	-0,020	-0,41	
269	FTIR	4,17	0,720	14,60	(**)
270	FTIR	3,57	0,120	2,43	
271	FTIR	3,54	0,090	1,83	
272	FTIR	0,32	-3,130	-63,49	(*)
273	FTIR	3,38	-0,070	-1,42	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

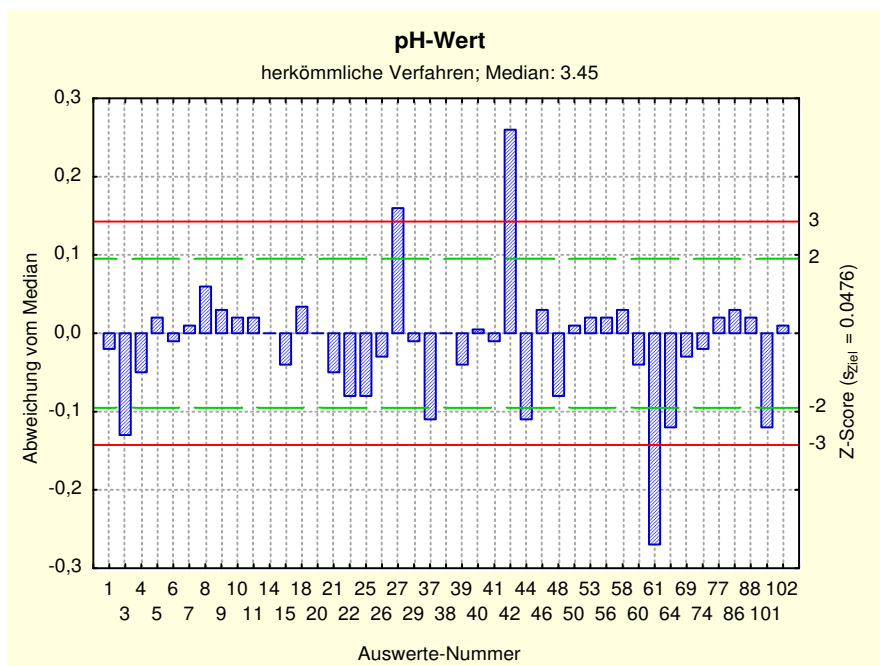
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
274	FTIR	3,47	0,020	0,41	
275	FTIR	3,61	0,160	3,25	
276	FTIR	3,60	0,150	3,04	
277	FTIR	3,45	0,000	0,00	
278	FTIR	3,41	-0,040	-0,81	
279	FTIR	3,41	-0,040	-0,81	
280	FTIR	3,60	0,150	3,04	
281	FTIR	3,37	-0,080	-1,62	
282	FTIR	3,37	-0,080	-1,62	
283	FTIR	3,39	-0,060	-1,22	
319	FTIR	3,13	-0,320	-6,49	(**)
320	FTIR	3,35	-0,100	-2,03	
336	FTIR	3,47	0,020	0,41	
337	FTIR	3,57	0,120	2,43	
349	FTIR	2,96	-0,490	-9,94	(**)
364	FTIR	3,34	-0,110	-2,23	

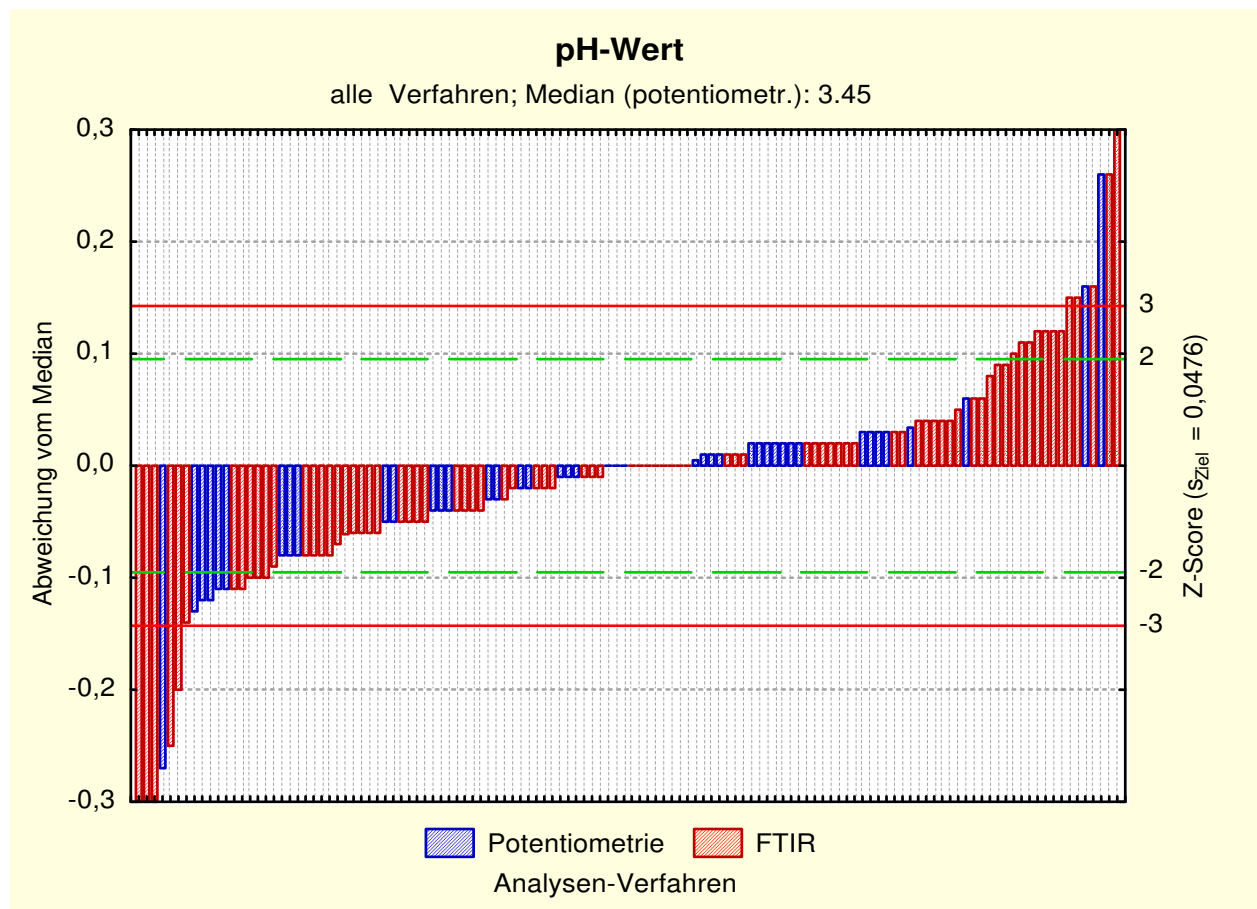
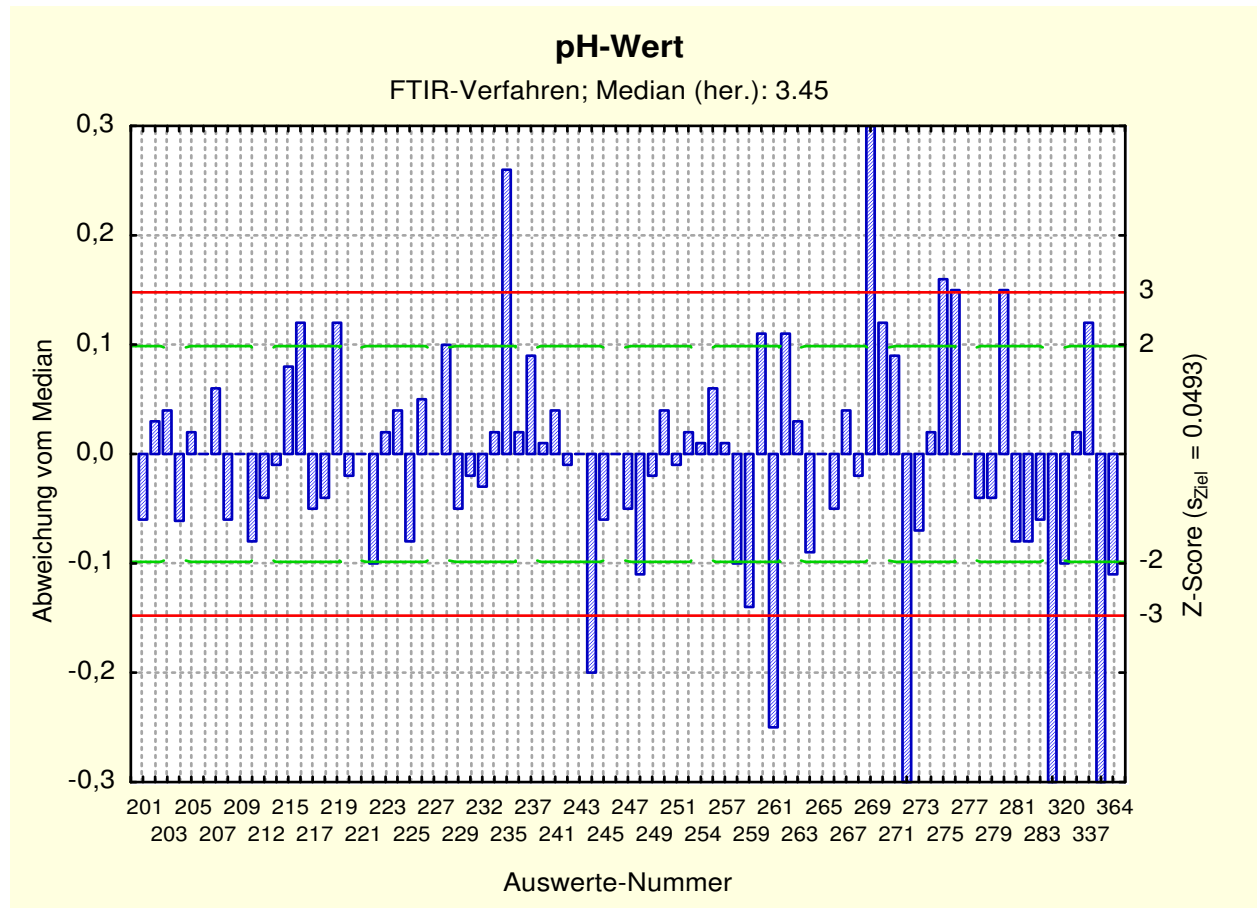
(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom herkömmlichen Bezugswert ab.

(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert ab.

**4.8.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	43	41
Minimalwert	3,18	3,32
Mittelwert	3,435	3,435
Median	3,450	3,450
Maximalwert	3,71	3,61
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,0802	0,0568
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,0122	0,0089
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,0493	0,0493
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,68	1,19
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,63	1,15
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,26	0,19
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,25	0,18





## 4.9 Gesamtsäure [g/L]

### 4.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 5.2.1	5,24	-0,110	-0,47	-1,03	
03	LwK 5.2.1	5,33	-0,020	-0,09	-0,19	
04	phot.aut.	5,87	0,520	2,21	4,85	
05	LwK 5.2.1	5,32	-0,030	-0,13	-0,28	
06	LwK 5.1	5,21	-0,140	-0,60	-1,31	
07	LwK 5.2.1	5,21	-0,140	-0,60	-1,31	
08	LwK 5.2.1	6,03	0,680	2,89	6,35	(**)
09	LwK 5.2.1	5,27	-0,080	-0,34	-0,75	
10	LwK 5.2.1	5,26	-0,090	-0,38	-0,84	
11	LwK 5.1	5,13	-0,220	-0,94	-2,05	
14	LwK 5.1	5,67	0,320	1,36	2,99	
15	LwK 5.2.1	5,35	0,000	0,00	0,00	
18	LwK 5.2.1	5,53	0,180	0,77	1,68	
20	LwK 5.1	5,35	0,000	0,00	0,00	
21	LwK 5.1	5,26	-0,090	-0,38	-0,84	
22	LwK 5.1	5,20	-0,150	-0,64	-1,40	
23	LwK 5.1	5,60	0,250	1,06	2,33	
25	LwK 5.1	5,39	0,040	0,17	0,37	
26	LwK 5.1	5,30	-0,050	-0,21	-0,47	
27	LwK 5.1	5,35	0,000	0,00	0,00	
29	LwK 5.2.1	5,47	0,120	0,51	1,12	
31	LwK 5.1	5,30	-0,050	-0,21	-0,47	
34	LwK 5.2.1	5,30	-0,050	-0,21	-0,47	
37	LwK 5.1	5,36	0,010	0,04	0,09	
38	LwK 5.1	5,40	0,050	0,21	0,47	
39	LwK 5.2.1	5,37	0,020	0,09	0,19	
40	LwK 5.1	5,23	-0,120	-0,51	-1,12	
41	LwK 5.1	5,40	0,050	0,21	0,47	
42	LwK 5.1	5,28	-0,070	-0,30	-0,65	
44	LwK 5.3	5,50	0,150	0,64	1,40	
46	LwK 5.1	5,50	0,150	0,64	1,40	
48	LwK 5.1	5,30	-0,050	-0,21	-0,47	
50	LwK 5.1	5,37	0,020	0,09	0,19	
52	LwK 5.2.1	5,55	0,200	0,85	1,87	
53	LwK 5.2.1	5,30	-0,050	-0,21	-0,47	
55	LwK 5.2.2	5,74	0,390	1,66	3,64	
56	LwK 5.2.1	5,30	-0,050	-0,21	-0,47	
58	LwK 5.1	5,60	0,250	1,06	2,33	
60	LwK 5.2.1	5,90	0,550	2,34	5,13	(**)
61	LwK 5.1	5,60	0,250	1,06	2,33	
64	LwK 5.1	5,56	0,210	0,89	1,96	
69	LwK 5.2.1	5,88	0,530	2,25	4,95	
74	LwK 5.1	6,33	0,980	4,17	9,15	(**)
77	LwK 5.2.2	5,20	-0,150	-0,64	-1,40	
86	LwK 5.2.1	5,28	-0,070	-0,30	-0,65	
87	LwK 5.2.1	5,37	0,020	0,09	0,19	
96	LwK 5.1	5,40	0,050	0,21	0,47	
101	LwK 5.1	5,57	0,220	0,94	2,05	
102	LwK 5.2.1	5,13	-0,220	-0,94	-2,05	

(\*\*) Diese Werte wurden bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.



## 4.9.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	5,43	0,080	0,34	0,55	
202	LwK 5.3	5,53	0,180	0,77	1,24	
203	LwK 5.3	5,39	0,040	0,17	0,28	
204	LwK 5.3	5,48	0,128	0,54	0,88	
205	LwK 5.3	5,42	0,070	0,30	0,48	
206	LwK 5.3	5,59	0,240	1,02	1,66	
207	LwK 5.3	5,42	0,070	0,30	0,48	
208	LwK 5.3	6,00	0,650	2,76	4,48	
209	LwK 5.3	5,43	0,080	0,34	0,55	
211	LwK 5.3	5,50	0,150	0,64	1,03	
212	LwK 5.3	5,61	0,260	1,11	1,79	
214	LwK 5.3	5,70	0,350	1,49	2,41	
215	LwK 5.3	5,43	0,080	0,34	0,55	
216	LwK 5.3	5,30	-0,050	-0,21	-0,34	
217	LwK 5.3	5,54	0,190	0,81	1,31	
218	LwK 5.3	5,55	0,200	0,85	1,38	
219	LwK 5.3	5,80	0,450	1,91	3,10	
220	LwK 5.3	5,42	0,070	0,30	0,48	
221	LwK 5.3	5,32	-0,030	-0,13	-0,21	
222	LwK 5.3	5,50	0,150	0,64	1,03	
223	LwK 5.3	5,50	0,150	0,64	1,03	
224	LwK 5.3	5,98	0,630	2,68	4,34	
225	LwK 5.3	5,45	0,100	0,43	0,69	
226	LwK 5.3	5,80	0,450	1,91	3,10	
227	LwK 5.3	5,60	0,250	1,06	1,72	
228	LwK 5.3	5,02	-0,330	-1,40	-2,28	
229	LwK 5.3	5,58	0,230	0,98	1,59	
231	LwK 5.3	5,39	0,040	0,17	0,28	
232	LwK 5.3	5,68	0,330	1,40	2,28	
234	LwK 5.3	5,34	-0,010	-0,04	-0,07	
235	LwK 5.3	5,40	0,050	0,21	0,34	
236	LwK 5.3	5,84	0,490	2,08	3,38	
237	LwK 5.3	5,60	0,250	1,06	1,72	
240	LwK 5.3	5,61	0,260	1,11	1,79	
241	LwK 5.3	5,70	0,350	1,49	2,41	
242	LwK 5.3	5,33	-0,020	-0,09	-0,14	
243	LwK 5.3	5,40	0,050	0,21	0,34	
244	LwK 5.3	5,49	0,140	0,60	0,97	
245	LwK 5.3	5,91	0,560	2,38	3,86	
246	LwK 5.3	5,50	0,150	0,64	1,03	
247	LwK 5.3	5,42	0,070	0,30	0,48	
248	LwK 5.3	6,04	0,690	2,93	4,76	
249	LwK 5.3	5,60	0,250	1,06	1,72	
250	LwK 5.3	5,43	0,080	0,34	0,55	
251	LwK 5.3	5,94	0,590	2,51	4,07	
252	LwK 5.3	5,75	0,400	1,70	2,76	
254	LwK 5.3	5,60	0,250	1,06	1,72	
255	LwK 5.3	5,70	0,350	1,49	2,41	
256	LwK 5.3	5,44	0,090	0,38	0,62	
257	LwK 5.3	5,45	0,100	0,43	0,69	
258	LwK 5.3	5,87	0,520	2,21	3,59	
259	LwK 5.3	5,76	0,410	1,74	2,83	
260	LwK 5.3	5,40	0,050	0,21	0,34	
261	LwK 5.3	5,70	0,350	1,49	2,41	
262	LwK 5.3	5,20	-0,150	-0,64	-1,03	
263	LwK 5.3	5,70	0,350	1,49	2,41	
264	LwK 5.3	5,20	-0,150	-0,64	-1,03	
265	LwK 5.3	5,47	0,120	0,51	0,83	
266	LwK 5.3	5,36	0,010	0,04	0,07	
267	LwK 5.3	5,93	0,580	2,47	4,00	
268	LwK 5.3	5,47	0,125	0,53	0,86	
269	LwK 5.3	7,10	1,750	7,44	12,07	(**)
270	LwK 5.3	5,80	0,450	1,91	3,10	
271	LwK 5.3	5,92	0,570	2,42	3,93	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
272	LwK 5.3	5,30	-0,050	-0,21	-0,34	
273	LwK 5.3	5,27	-0,080	-0,34	-0,55	
274	LwK 5.3	6,19	0,840	3,57	5,79	(**)
275	LwK 5.3	5,60	0,250	1,06	1,72	
276	LwK 5.3	5,20	-0,150	-0,64	-1,03	
277	LwK 5.3	5,61	0,260	1,11	1,79	
278	LwK 5.3	5,53	0,180	0,77	1,24	
279	LwK 5.3	5,31	-0,040	-0,17	-0,28	
280	LwK 5.3	5,20	-0,150	-0,64	-1,03	
281	LwK 5.3	5,81	0,460	1,96	3,17	
282	LwK 5.3	5,59	0,240	1,02	1,66	
283	LwK 5.3	5,50	0,150	0,64	1,03	
312	LwK 5.3	5,44	0,090	0,38	0,62	
319	LwK 5.3	5,00	-0,350	-1,49	-2,41	
320	LwK 5.3	5,35	0,000	0,00	0,00	
323	LwK 5.3	5,80	0,450	1,91	3,10	
336	LwK 5.3	5,88	0,530	2,25	3,66	
337	LwK 5.3	5,60	0,250	1,06	1,72	
343	LwK 5.3	5,61	0,260	1,11	1,79	
349	LwK 5.3	5,10	-0,250	-1,06	-1,72	
364	LwK 5.3	5,60	0,250	1,06	1,72	
368	LwK 5.3	5,70	0,350	1,49	2,41	

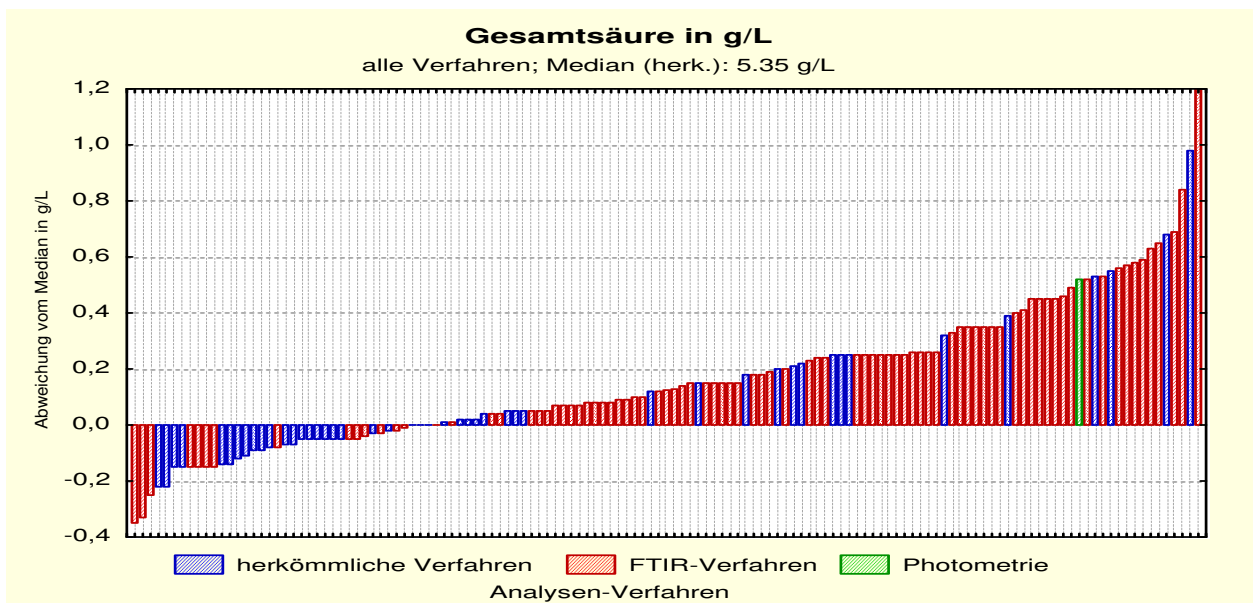
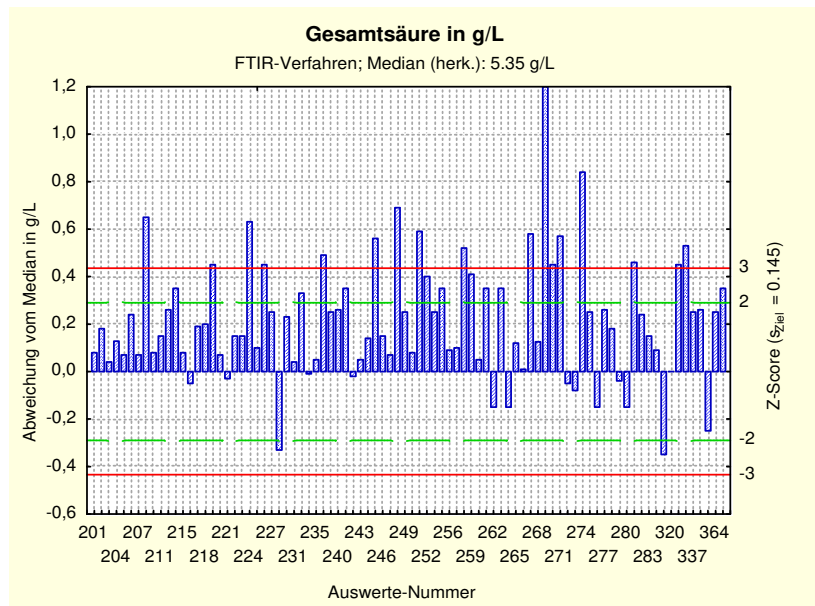
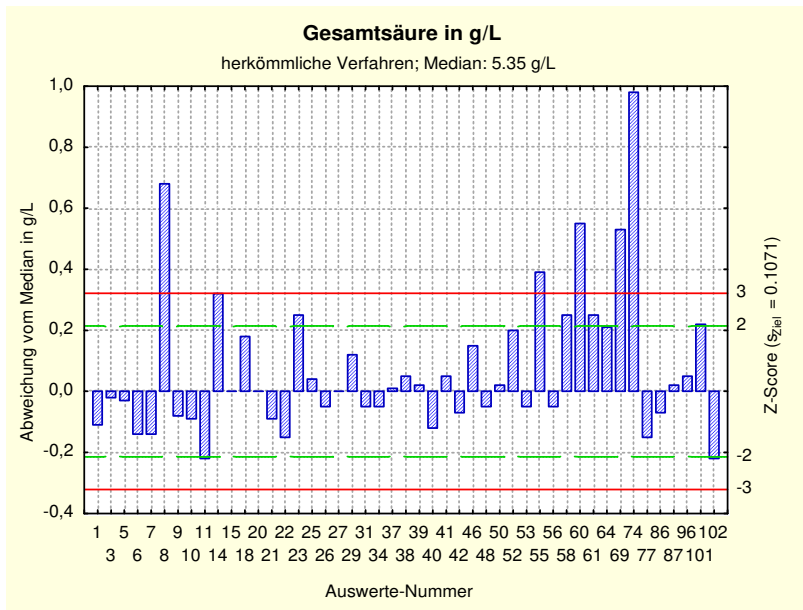
(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**4.9.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten	ber.Daten
Gültige Werte	47	44
Minimalwert	5,13	5,13
Mittelwert	5,425	5,380
Median	5,350	5,350
Maximalwert	6,33	5,88
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,240	0,164
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,035	0,025
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,235	0,235
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,107	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,145	0,145
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,02	0,70
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	2,24	1,53
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	1,66	1,13
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,15	0,10
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,33	0,23
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,24	0,17

**4.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV OIV-MA-AS-313-01;	25	5,400	0,174
LwK 5.2.1	Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	20	5,368	0,160
LwK 5.2.2	Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator	2	5,470	0,433
	herkömmliche Verfahren	47	5,390	0,176
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	87	5,551	0,233
phot.aut.	photometrisch m. Bromkresolpurpur, automatisiert	1	5,870	



## 4.10 Weinsäure [g/L]

### 4.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	2,13	-0,036	-0,33	
02	IC	2,05	-0,116	-1,07	
03	IC	2,07	-0,096	-0,88	
05	photometr.	2,00	-0,166	-1,52	
06	HPLC	2,15	-0,016	-0,15	
07	HPLC	2,07	-0,096	-0,88	
08	HPLC	2,17	0,004	0,03	
10	photometr., autom.	2,07	-0,096	-0,88	
11	photometr.	2,42	0,254	2,33	
15	photometr., autom.	3,00	0,834	7,64	(**)
21	HPLC	3,83	1,664	15,25	(*)
22	NMR	2,34	0,174	1,59	
25	photometr., autom.	2,05	-0,116	-1,07	
26	HPLC	2,31	0,144	1,32	
29	photometr., autom.	1,70	-0,466	-4,27	
38	photometr., autom.	2,17	0,004	0,03	
39	HPLC	2,16	-0,004	-0,03	
40	photometr., autom.	2,39	0,224	2,05	
44	photometr., autom.	2,26	0,094	0,86	
48	photometr., autom.	2,20	0,034	0,31	
50	HPLC	2,25	0,084	0,77	
56	photometr., autom.	2,30	0,134	1,23	
58	photometr., autom.	2,19	0,024	0,22	
61	photometr., autom.	0,93	-1,236	-11,33	(*)
94	HPLC	2,58	0,414	3,79	
97	photometr.	1,94	-0,231	-2,12	
103	NMR	2,20	0,034	0,31	
104	NMR	2,07	-0,098	-0,90	
105	NMR	2,06	-0,106	-0,97	
106	NMR	1,95	-0,214	-1,96	
107	NMR	2,28	0,117	1,07	

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

### 4.10.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,32	1,150	10,53	5,07	(*)
202	FTIR	3,70	1,530	14,01	6,74	(*)
203	FTIR	3,20	1,030	9,43	4,54	
204	FTIR	2,55	0,384	3,52	1,69	
205	FTIR	1,31	-0,860	-7,87	-3,79	
206	FTIR	3,38	1,210	11,08	5,33	(*)
208	FTIR	2,30	0,130	1,19	0,57	
209	FTIR	2,28	0,110	1,01	0,48	
211	FTIR	2,74	0,570	5,22	2,51	
212	FTIR	2,07	-0,100	-0,92	-0,44	
214	FTIR	2,20	0,030	0,27	0,13	
215	FTIR	2,81	0,640	5,86	2,82	
216	FTIR	5,30	3,130	28,65	13,79	(*)
217	FTIR	3,16	0,990	9,06	4,36	
218	FTIR	3,09	0,920	8,42	4,05	
219	FTIR	3,30	1,130	10,34	4,98	
220	FTIR	2,75	0,580	5,31	2,56	
221	FTIR	3,36	1,190	10,89	5,24	(*)
222	FTIR	2,64	0,470	4,30	2,07	
223	FTIR	3,20	1,030	9,43	4,54	
224	FTIR	2,38	0,210	1,92	0,93	
225	FTIR	2,31	0,140	1,28	0,62	

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlich bestimmten Werte ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
226	FTIR	2,30	0,130	1,19	0,57	
227	FTIR	3,33	1,160	10,62	5,11	(*)
228	FTIR	2,61	0,440	4,03	1,94	
229	FTIR	3,33	1,160	10,62	5,11	(*)
231	FTIR	2,60	0,430	3,94	1,89	
232	FTIR	3,32	1,150	10,53	5,07	(*)
234	FTIR	3,56	1,390	12,72	6,12	(*)
235	FTIR	2,30	0,130	1,19	0,57	
236	FTIR	2,15	-0,020	-0,18	-0,09	
237	FTIR	3,40	1,230	11,26	5,42	(*)
240	FTIR	3,41	1,240	11,35	5,46	(*)
241	FTIR	2,40	0,230	2,11	1,01	
242	FTIR	1,42	-0,750	-6,87	-3,30	
243	FTIR	1,70	-0,470	-4,30	-2,07	
244	FTIR	2,48	0,310	2,84	1,37	
245	FTIR	3,01	0,840	7,69	3,70	
246	FTIR	3,40	1,230	11,26	5,42	(*)
247	FTIR	2,51	0,340	3,11	1,50	
249	FTIR	3,10	0,930	8,51	4,10	
250	FTIR	3,53	1,360	12,45	5,99	(*)
252	FTIR	2,38	0,210	1,92	0,93	
254	FTIR	3,30	1,130	10,34	4,98	
256	FTIR	1,92	-0,250	-2,29	-1,10	
257	FTIR	4,17	2,000	18,31	8,81	(*)
258	FTIR	3,48	1,310	11,99	5,77	(*)
259	FTIR	2,51	0,340	3,11	1,50	
260	FTIR	2,20	0,030	0,27	0,13	
261	FTIR	3,40	1,230	11,26	5,42	(*)
262	FTIR	3,30	1,130	10,34	4,98	
264	FTIR	2,30	0,130	1,19	0,57	
265	FTIR	3,94	1,770	16,20	7,80	(*)
266	FTIR	2,70	0,530	4,85	2,33	
267	FTIR	2,47	0,300	2,75	1,32	
268	FTIR	3,30	1,130	10,34	4,98	
269	FTIR	2,85	0,680	6,22	3,00	
270	FTIR	3,30	1,130	10,34	4,98	
271	FTIR	3,25	1,080	9,89	4,76	
272	FTIR	2,60	0,430	3,94	1,89	
273	FTIR	3,47	1,300	11,90	5,73	(*)
274	FTIR	2,34	0,170	1,56	0,75	
275	FTIR	3,40	1,230	11,26	5,42	(*)
276	FTIR	3,50	1,330	12,17	5,86	(*)
277	FTIR	3,24	1,070	9,79	4,71	
278	FTIR	2,62	0,450	4,12	1,98	
279	FTIR	2,52	0,350	3,20	1,54	
280	FTIR	2,90	0,730	6,68	3,22	
282	FTIR	3,53	1,360	12,45	5,99	(*)
283	FTIR	3,60	1,430	13,09	6,30	(*)
319	FTIR	2,60	0,430	3,94	1,89	
320	FTIR	2,58	0,410	3,75	1,81	
336	FTIR	2,12	-0,050	-0,46	-0,22	
337	FTIR	1,80	-0,370	-3,39	-1,63	
349	FTIR	2,90	0,730	6,68	3,22	
364	FTIR	2,70	0,530	4,85	2,33	

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlich bestimmten Werte ab.

**Anmerkung:**

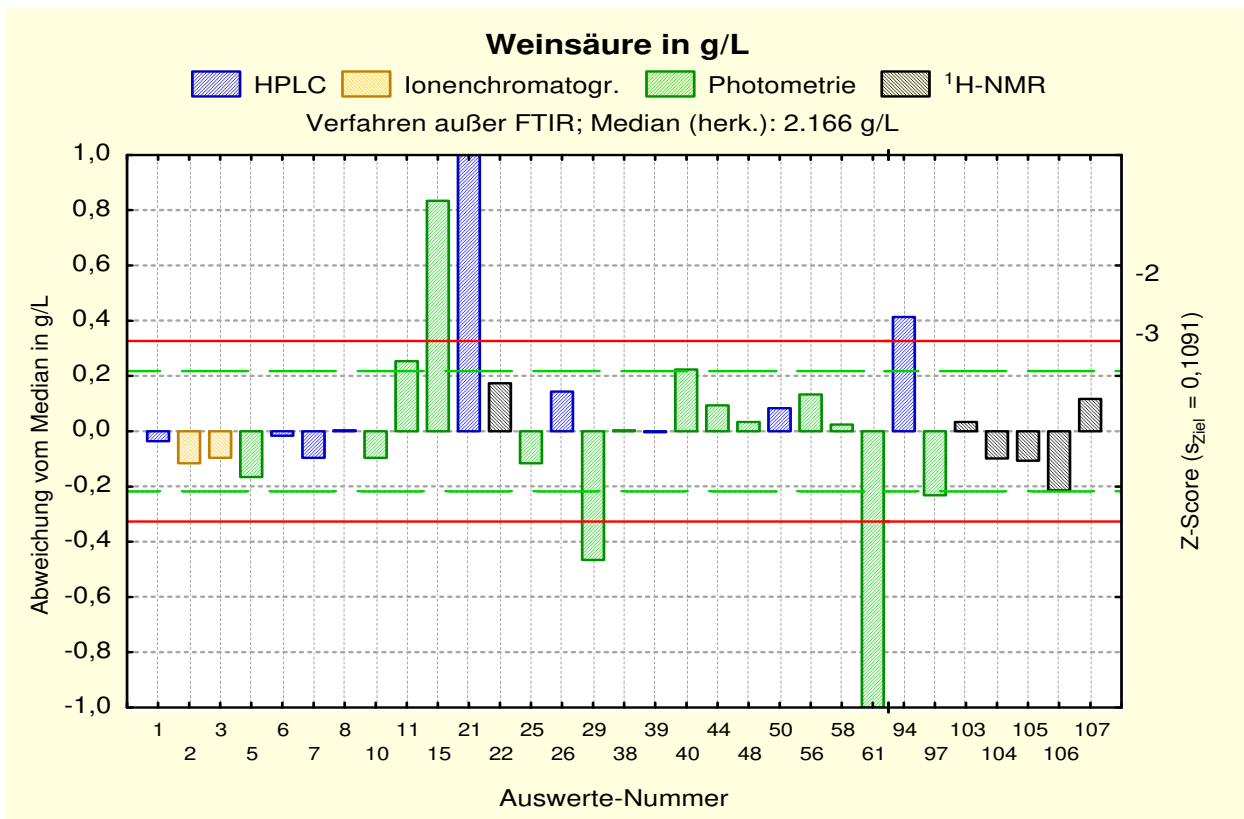
Der Anteil an FTIR-Laborergebnissen, die um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte abweichen, ist mit 22 von 76 Laborergebnissen auffällig hoch, obwohl ein gut messbarer Gehalt vorliegt. Dies spricht für den Einsatz von einer oder mehreren Parameterkalibrierungen, die auf das vorliegende Erzeugnis mit einem starken Matrixeffekt reagieren und daher überprüft bzw. ausgetauscht werden sollten.

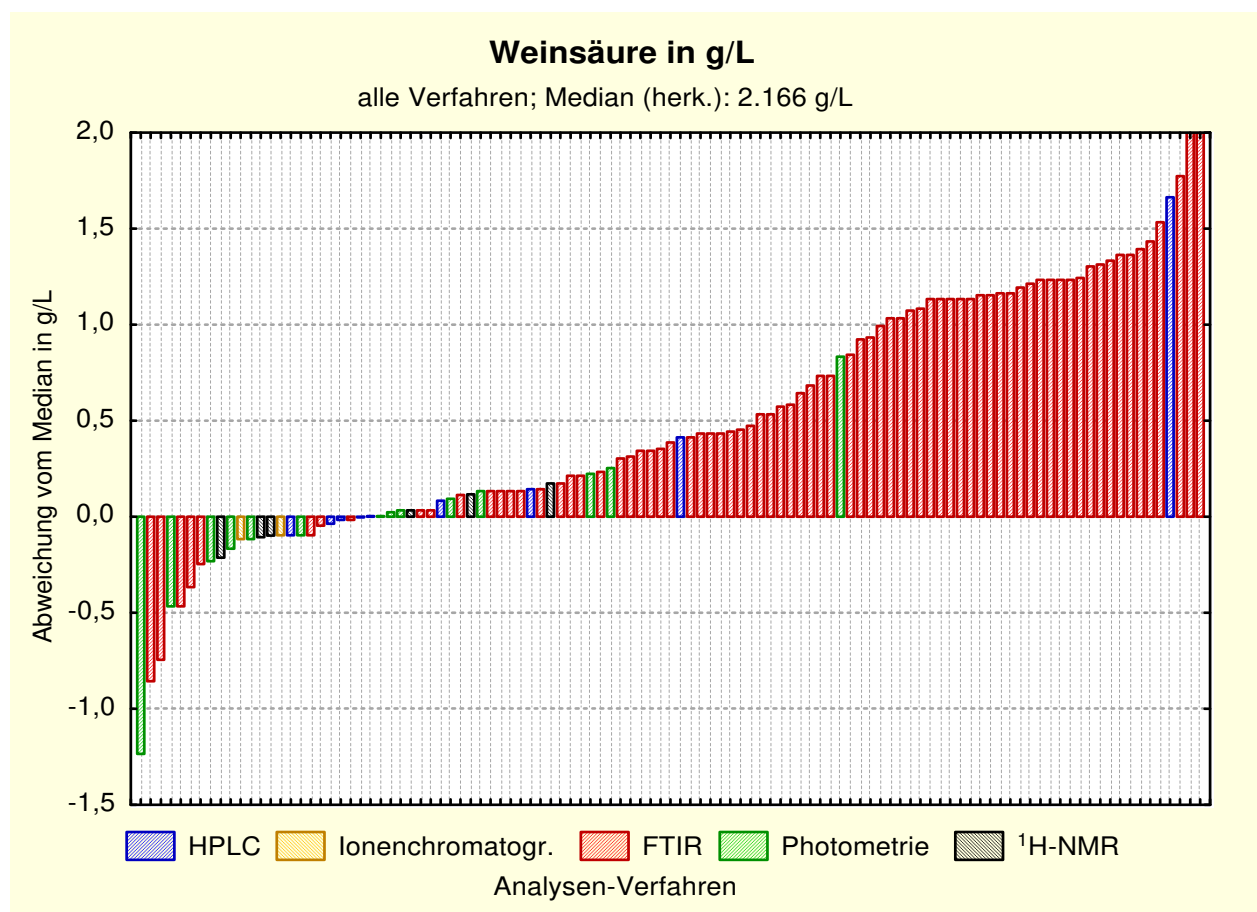
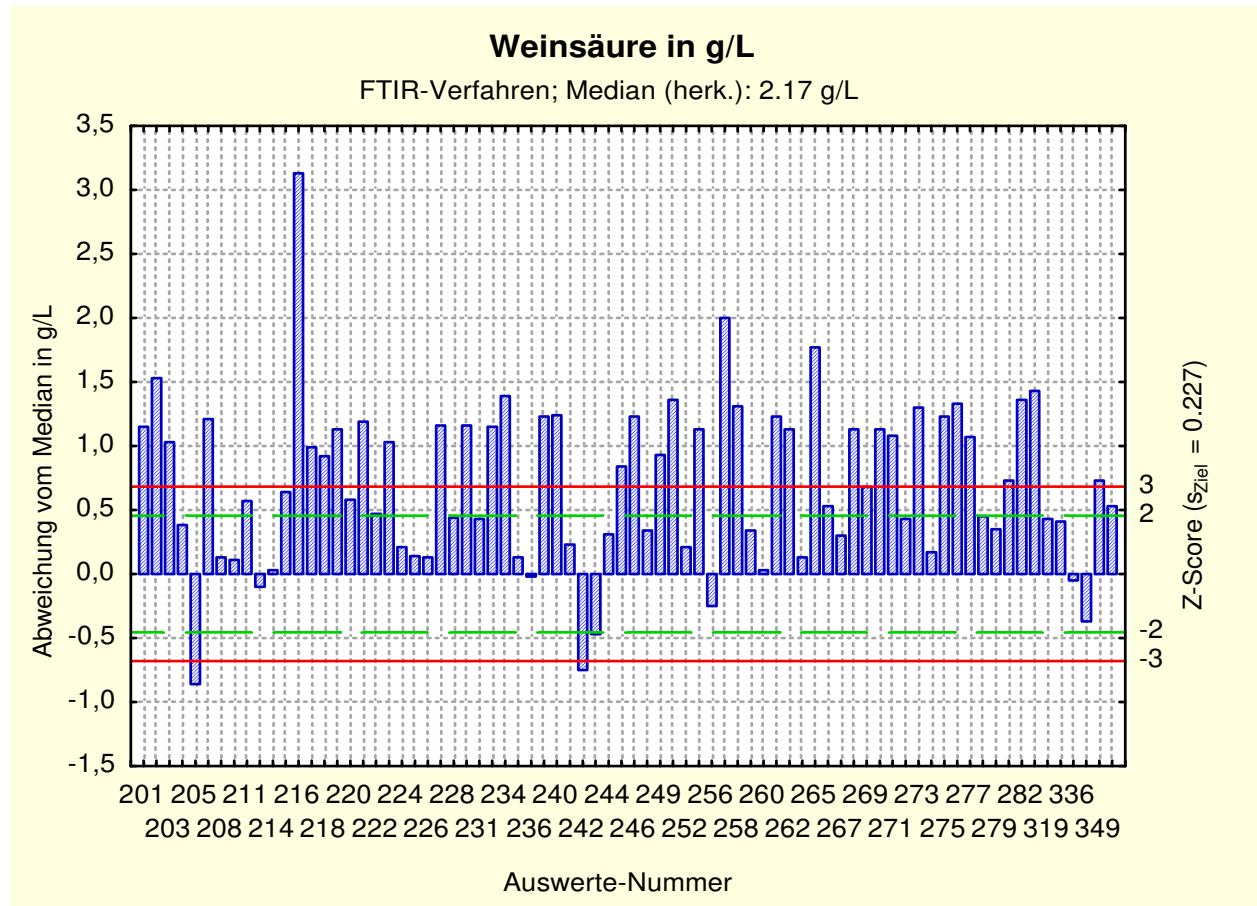
**4.10.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC + IC alle Daten	herkömml. Verfahren alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	10	23	22
Minimalwert	2,05	1,70	1,70
Mittelwert	2,194	2,201	2,165
Median	2,156	2,170	2,166
Maximalwert	2,58	3,00	2,58
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,158	0,249	0,182
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,050	0,052	0,039
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,109	0,109	0,109
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )			
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,227	0,227	0,227
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,45	2,28	1,67
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )			
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,70	1,10	0,80
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,46	0,48	0,36
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,22	0,23	0,17

**4.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	9	2,267	0,216
IC	Ionenchromatographie	2	2,060	0,016
	HPLC + IC	11	2,205	0,161
photometr.	photometrisch n. Rebelein	3	2,111	0,285
phot.autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	11	2,148	0,309
	alle herkömmlichen Verfahren	25	2,183	0,205
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	2,868	0,610
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,151	0,168





## 4.11 Flüchtige Säure [g/L]

### 4.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis: Werte mit SO<sub>2</sub>-Korrektur und experimentelle Zielstandardabweichung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	OIV SO2-korr.	0,275	-0,0050	-0,26	-0,18	
03	OIV SO2-korr.	0,330	0,0500	2,61	1,75	
06	Gerhardt SO2 korr.	0,294	0,0140	0,73	0,49	
07	Halbmikro SO2 korr.	0,315	0,0350	1,82	1,22	
08	OIV o. SO2-korr.	0,300	0,0200	1,04	0,70	
09	OIV SO2-korr.	0,224	-0,0560	-2,92	-1,96	
10	Halbmikro SO2 korr.	0,301	0,0210	1,09	0,73	
20	Gerhardt SO2 korr.	0,330	0,0500	2,61	1,75	
21	Halbmikro SO2 unber.	0,370	0,0900	4,69	3,15	
25	Gerhardt SO2 korr.	0,280	0,0000	0,00	0,00	
26	Gerhardt SO2 ausg.	0,370	0,0900	4,69	3,15	
29	Gerhardt SO2 korr.	0,290	0,0100	0,52	0,35	
31	Halbmikro SO2 korr.	0,270	-0,0100	-0,52	-0,35	
37	Halbmikro SO2 unber.	0,378	0,0980	5,11	3,43	
38	Gerhardt SO2 korr.	0,242	-0,0380	-1,98	-1,33	
39	Gerhardt SO2 korr.	0,269	-0,0110	-0,57	-0,39	
40	Gerhardt SO2 ausg.	0,318	0,0380	1,98	1,33	
41	Gerhardt SO2 ausg.	0,279	-0,0008	-0,04	-0,03	
42	Halbmikro SO2 unber.	0,360	0,0800	4,17	2,80	
44	Halbmikro SO2 korr.	0,300	0,0200	1,04	0,70	
50	Halbmikro SO2 korr.	0,175	-0,1050	-5,47	-3,68	
56	Rentschler mod. korr.	0,330	0,0500	2,61	1,75	
58	OIV SO2-korr.	0,280	0,0000	0,00	0,00	
60	Wädenswil SO2 unber.	0,370	0,0900	4,69	3,15	
64	Halbmikro SO2 unber.	0,290	0,0100	0,52	0,35	
66	Wädenswil SO2 unber.	0,400	0,1200	6,26	4,20	
68	Wädenswil SO2 unber.	0,380	0,1000	5,21	3,50	
88	OIV SO2-korr.	0,267	-0,0130	-0,68	-0,46	
89	Halbmikro SO2 korr.	0,278	-0,0020	-0,10	-0,07	
101	Halbmikro SO2 unber.	0,350	0,0700	3,65	2,45	

### 4.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,480	0,2000	10,43	2,24	
202	FTIR	0,400	0,1200	6,26	1,35	
203	FTIR	0,430	0,1500	7,82	1,68	
204	FTIR	0,407	0,1270	6,62	1,43	
205	FTIR	0,410	0,1300	6,78	1,46	
206	FTIR	0,360	0,0800	4,17	0,90	
208	FTIR	0,070	-0,2100	-10,95	-2,36	
209	FTIR	0,229	-0,0510	-2,66	-0,57	
211	FTIR	0,440	0,1600	8,34	1,80	
214	FTIR	0,330	0,0500	2,61	0,56	
215	FTIR	0,370	0,0900	4,69	1,01	
216	FTIR	0,180	-0,1000	-5,21	-1,12	
217	FTIR	0,360	0,0800	4,17	0,90	
218	FTIR	0,270	-0,0100	-0,52	-0,11	
219	FTIR	0,570	0,2900	15,12	3,25	
220	FTIR	0,410	0,1300	6,78	1,46	
221	FTIR	0,570	0,2900	15,12	3,25	
223	FTIR	0,450	0,1700	8,86	1,91	
224	FTIR	0,270	-0,0100	-0,52	-0,11	
225	FTIR	0,612	0,3320	17,31	3,73	
226	FTIR	0,320	0,0400	2,09	0,45	
227	FTIR	0,540	0,2600	13,55	2,92	
228	FTIR	0,110	-0,1700	-8,86	-1,91	
229	FTIR	0,377	0,0970	5,06	1,09	



**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
231	FTIR	0,320	0,0400	2,09	0,45	
232	FTIR	0,290	0,0100	0,52	0,11	
234	FTIR	0,320	0,0400	2,09	0,45	
235	FTIR	0,850	0,5700	29,71	6,40	(*)
236	FTIR	0,400	0,1200	6,26	1,35	
237	FTIR	0,500	0,2200	11,47	2,47	
240	FTIR	0,480	0,2000	10,43	2,24	
241	FTIR	0,370	0,0900	4,69	1,01	
242	FTIR	0,380	0,1000	5,21	1,12	
243	FTIR	0,270	-0,0100	-0,52	-0,11	
244	FTIR	0,280	0,0000	0,00	0,00	
245	FTIR	0,480	0,2000	10,43	2,24	
246	FTIR	0,480	0,2000	10,43	2,24	
247	FTIR	0,350	0,0700	3,65	0,79	
249	FTIR	0,450	0,1700	8,86	1,91	
250	FTIR	0,060	-0,2200	-11,47	-2,47	
251	FTIR	0,380	0,1000	5,21	1,12	
252	FTIR	0,360	0,0800	4,17	0,90	
254	FTIR	0,450	0,1700	8,86	1,91	
256	FTIR	0,380	0,1000	5,21	1,12	
257	FTIR	0,550	0,2700	14,07	3,03	
258	FTIR	0,300	0,0200	1,04	0,22	
260	FTIR	0,240	-0,0400	-2,09	-0,45	
261	FTIR	0,320	0,0400	2,09	0,45	
262	FTIR	0,130	-0,1500	-7,82	-1,68	
263	FTIR	0,330	0,0500	2,61	0,56	
264	FTIR	0,450	0,1700	8,86	1,91	
265	FTIR	0,530	0,2500	13,03	2,81	
266	FTIR	0,420	0,1400	7,30	1,57	
267	FTIR	0,630	0,3500	18,24	3,93	
268	FTIR	0,365	0,0850	4,43	0,95	
269	FTIR	1,750	1,4700	76,63	16,50	(*)
270	FTIR	0,380	0,1000	5,21	1,12	
271	FTIR	0,280	0,0000	0,00	0,00	
272	FTIR	0,320	0,0400	2,09	0,45	
273	FTIR	0,420	0,1400	7,30	1,57	
274	FTIR	3,470	3,1900	166,28	35,80	(*)
275	FTIR	0,270	-0,0100	-0,52	-0,11	
276	FTIR	0,320	0,0400	2,09	0,45	
277	FTIR	0,310	0,0300	1,56	0,34	
278	FTIR	0,360	0,0800	4,17	0,90	
279	FTIR	0,360	0,0800	4,17	0,90	
280	FTIR	0,340	0,0600	3,13	0,67	
281	FTIR	0,380	0,1000	5,21	1,12	
282	FTIR	0,480	0,2000	10,43	2,24	
283	FTIR	0,250	-0,0300	-1,56	-0,34	
319	FTIR	0,490	0,2100	10,95	2,36	
320	FTIR	0,280	0,0000	0,00	0,00	
336	FTIR	0,400	0,1200	6,26	1,35	
337	FTIR	0,390	0,1100	5,73	1,23	
349	FTIR	0,630	0,3500	18,24	3,93	
364	FTIR	0,440	0,1600	8,34	1,80	
368	FTIR	0,285	0,0050	0,26	0,06	

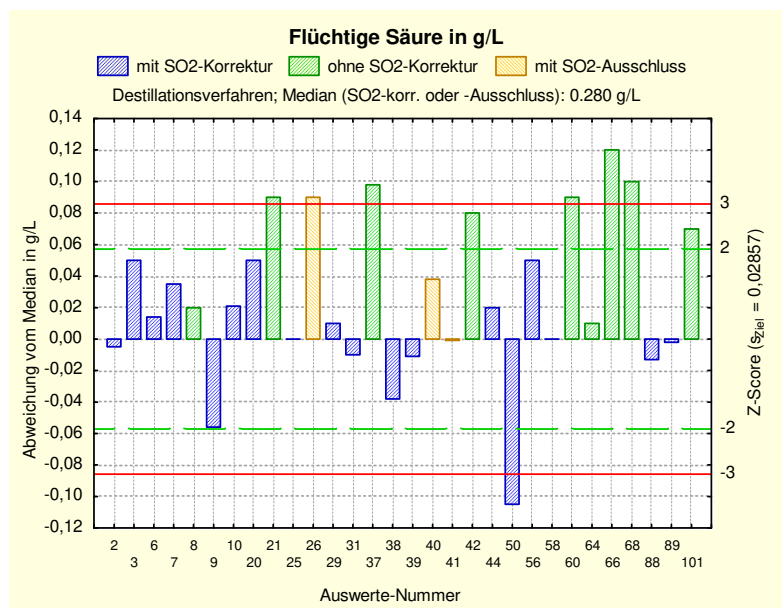
(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlich bestimmten Werte ab.

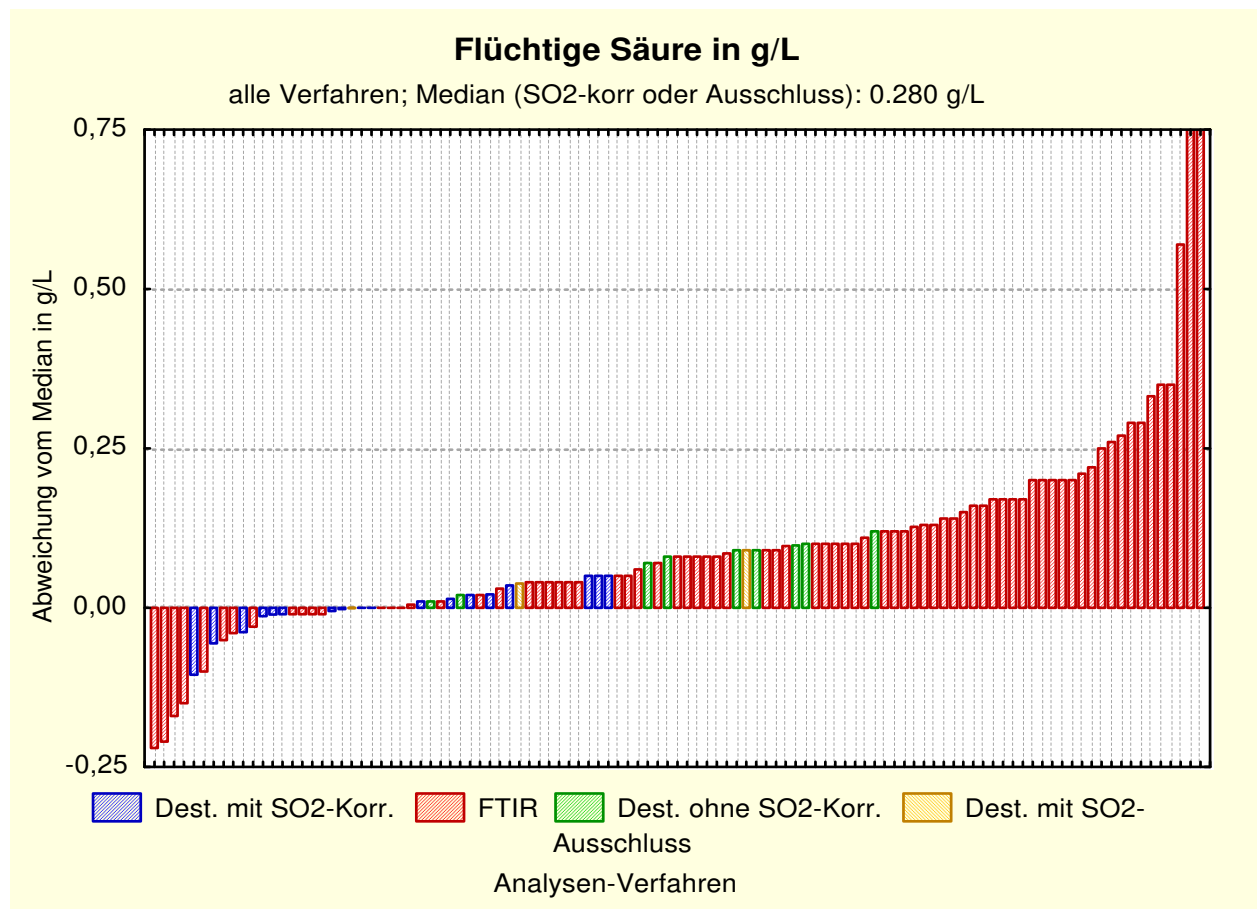
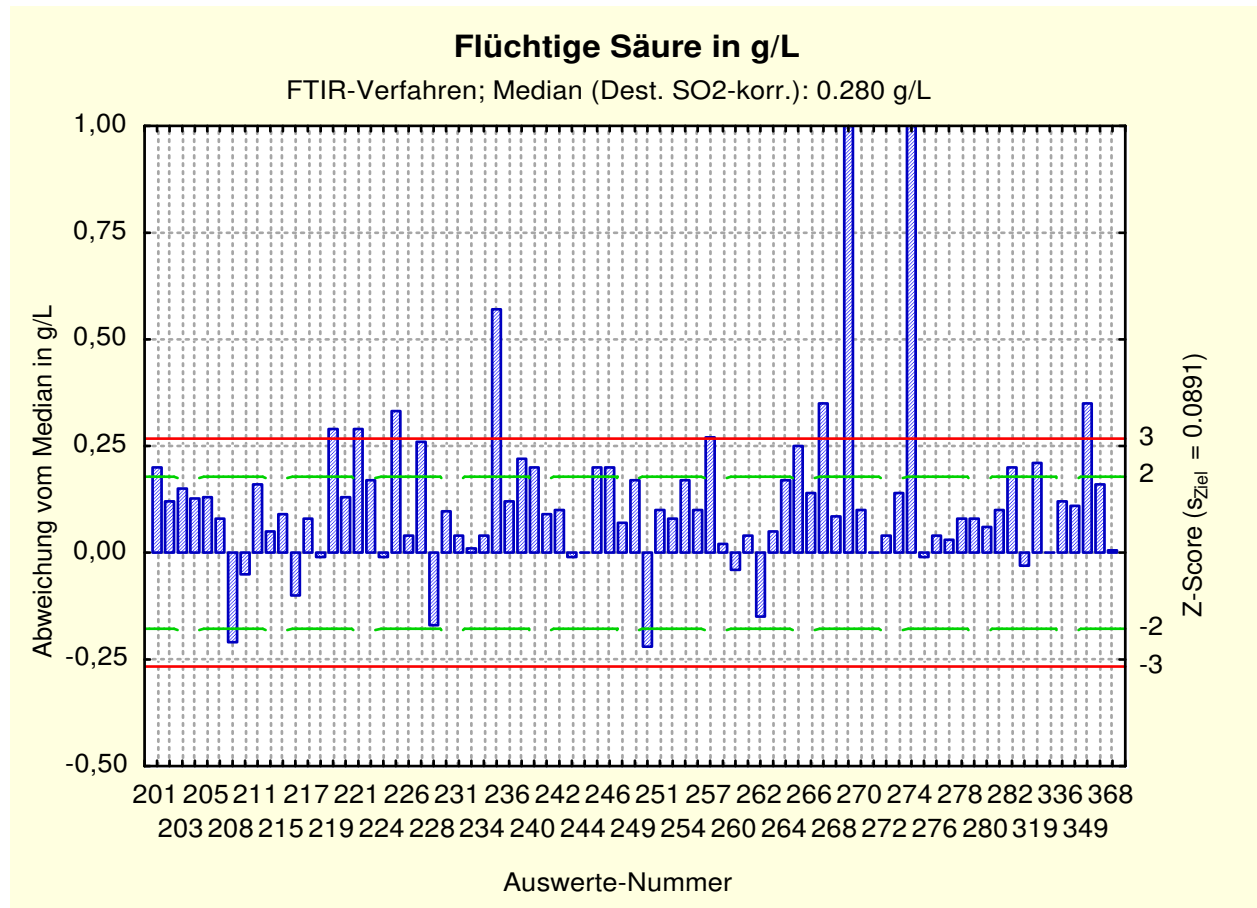
**4.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren**

Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L nur Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	alle Daten
Gültige Werte	21
Minimalwert	0,175
Mittelwert	0,2865
Median	0,2800
Maximalwert	0,370
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,042
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,009
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,019
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,089
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,17
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,45
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,47
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,47
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,32
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,10

**4.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro SO2 unber.	Halbmikrodestillation n. AVV SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	5	0,3502	0,0381
Halbmikro SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	6	0,2827	0,0336
Wädenswil SO2 unber.	Wädenswil-Verfahren SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	3	0,3833	0,0173
Gerhardt SO2 ausg.	Destillationsapparat Gerhardt SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	3	0,3224	0,0517
Gerhardt SO2 korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	6	0,2842	0,0314
OIV SO2-korr. o. SO2-korr.	OIV-MA-AS-313-02 einschl. SO <sub>2</sub> -Korrektur ohne SO <sub>2</sub> -Korrektur	5 1	0,2759 0,3000	0,0388
Rentschler mod. korr.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	1	0,3300	
	Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	21	0,2879	0,0332
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	77	0,3838	0,1141





## 4.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

### 4.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,184	-0,025	-1,67	
06	enzymat. autom.	0,209	0,000	0,00	
07	enzymat. autom.	0,170	-0,039	-2,61	
11	enzymat. autom.	0,190	-0,019	-1,27	
14	enzymat. autom.	0,240	0,031	2,07	
15	enzymat. autom.	0,180	-0,029	-1,94	
22	NMR	0,160	-0,049	-3,27	
25	enzymat. autom.	0,210	0,001	0,07	
26	HPLC	0,350	0,141	9,42	(*)
29	enzymat. autom.	0,250	0,041	2,74	
31	enzymat. autom.	0,220	0,011	0,74	
38	enzymat. autom.	0,190	-0,019	-1,27	
39	HPLC	<0,3			
41	enzymat. autom.	0,210	0,001	0,07	
44	enzymat. autom.	0,220	0,011	0,74	
48	enzymat. autom.	0,170	-0,039	-2,61	
50	enzymat. Hand	0,170	-0,039	-2,61	
53	enzymat. autom.	0,250	0,041	2,74	
56	enzymat. autom.	0,213	0,004	0,27	
58	enzymat. autom.	0,190	-0,019	-1,27	
61	enzymat. autom.	0,280	0,071	4,74	
69	enzymat. autom.	0,230	0,021	1,40	
89	NMR	0,195	-0,014	-0,94	
92	enzymat. autom.	0,190	-0,019	-1,27	
94	HPLC	0,180	-0,029	-1,94	
103	NMR	0,203	-0,006	-0,40	
104	NMR	0,176	-0,033	-2,23	
105	NMR	0,202	-0,007	-0,47	
106	NMR	0,181	-0,028	-1,84	
107	NMR	0,205	-0,004	-0,25	
209	FTIR	0,300	0,091	6,08	(***)
212	FTIR	0,400	0,191	12,76	(**)
222	FTIR	0,180	-0,029	-1,94	
241	FTIR	0,340	0,131	8,75	(**)
259	FTIR	0,680	0,471	31,48	(**)
260	FTIR	0,700	0,491	32,81	(**)

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und bleibt unberücksichtigt.

(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlich bestimmten Werte ab.

(\*\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

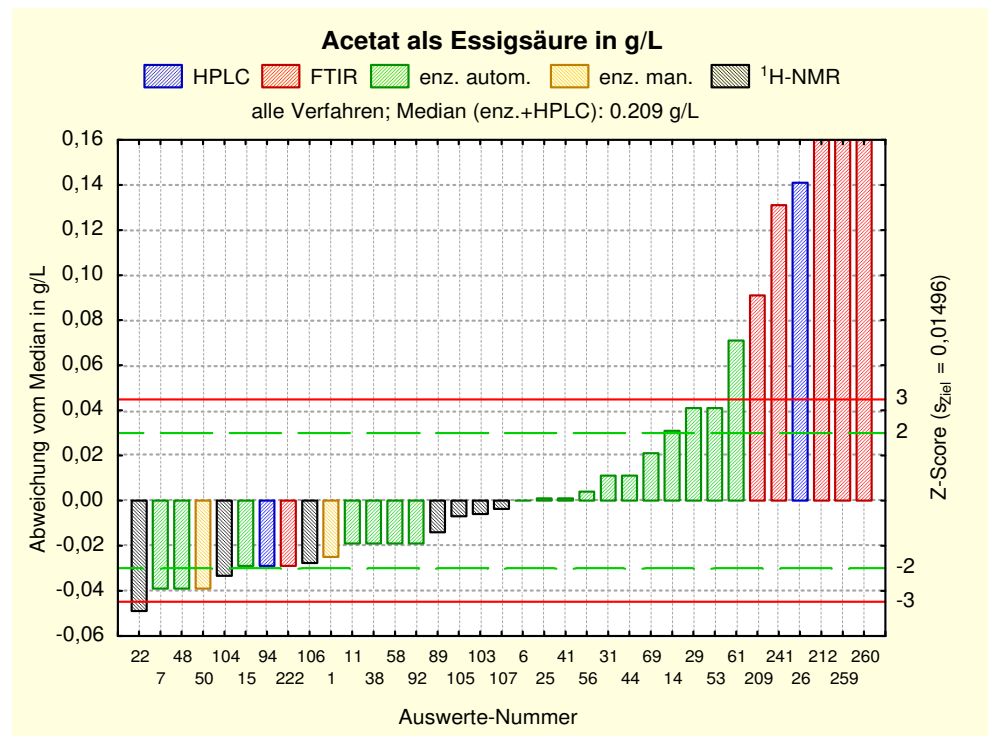
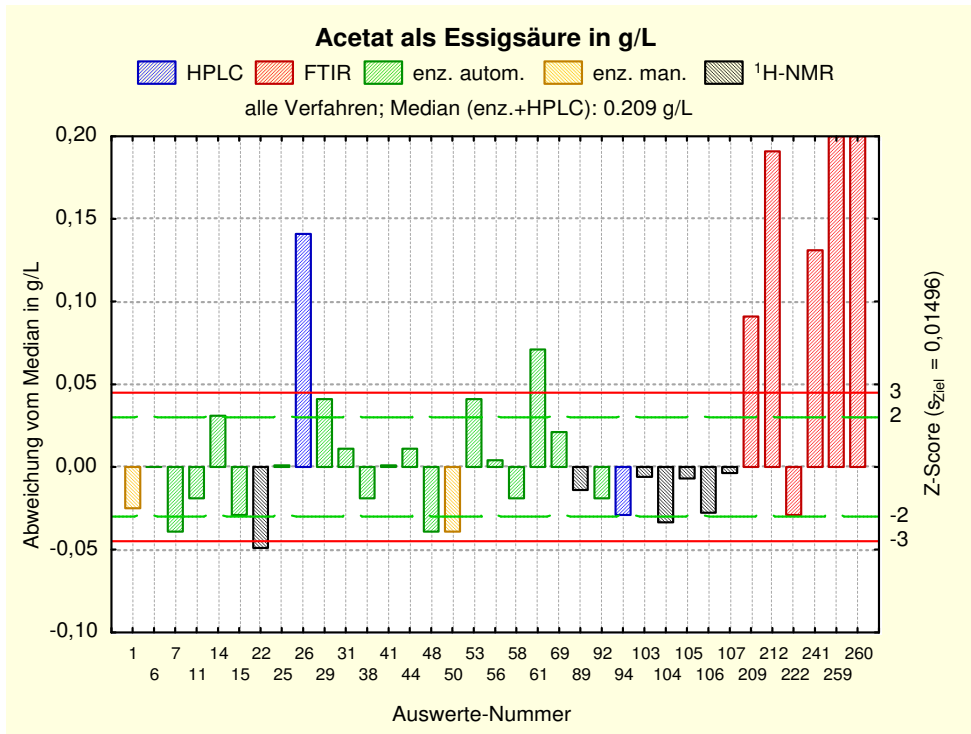
**Hinweis:** Alle Laborergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung nach Horwitz bewertet.

### 4.12.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	21
Minimalwert	0,170
Mittelwert	0,207
Median	0,209
Maximalwert	0,280
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,030
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,007
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,015
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ )	
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,02
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,44
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	

4.12.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	2	0,2650	0,1363
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	18	0,2105	0,0309
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	2	0,1770	0,0112
	herkömmliche Verfahren	22	0,2083	0,0334
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	0,4231	0,2229
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	7	0,1889	0,0193



### 4.13 Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]

#### 4.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	2,01	-0,153	-1,40	-2,10	
02	IC	2,10	-0,063	-0,58	-0,86	
06	HPLC	2,19	0,027	0,25	0,37	
07	HPLC	3,05	0,887	8,14	12,18	(**)
08	HPLC	2,42	0,257	2,36	3,53	
21	HPLC	2,09	-0,073	-0,67	-1,00	
22	NMR	2,30	0,137	1,26	1,88	
26	HPLC	2,10	-0,063	-0,58	-0,86	
39	HPLC	2,24	0,077	0,71	1,06	
50	HPLC	2,24	0,077	0,71	1,06	
86	enzymat. Hand	2,14	-0,027	-0,25	-0,37	
94	HPLC	2,35	0,187	1,72	2,57	
103	NMR	2,20	0,037	0,34	0,51	
104	NMR	2,07	-0,091	-0,83	-1,25	
105	NMR	2,24	0,077	0,71	1,06	
106	NMR	2,04	-0,120	-1,10	-1,65	
107	NMR	2,30	0,139	1,27	1,90	

(\*\*)Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

#### 4.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	2,01	-0,182	-1,65	-2,48	
04	enz.(L-), autom.	2,17	-0,015	-0,14	-0,20	
06	enz.(L-), autom.	2,19	0,000	0,00	0,00	
07	enz.(L-), autom.	2,27	0,080	0,73	1,09	
09	enz.(L-) Hand	2,08	-0,110	-1,00	-1,50	
10	enz.(L-), autom.	2,08	-0,110	-1,00	-1,50	
11	enz.(L-), autom.	2,42	0,230	2,09	3,13	
15	enz.(L-), autom.	2,00	-0,190	-1,73	-2,58	
25	enz.(L-), autom.	2,07	-0,120	-1,09	-1,63	
29	enz.(L-), autom.	2,50	0,310	2,82	4,22	
31	enz.(L-), autom.	2,32	0,130	1,18	1,77	
38	enz.(L-), autom.	2,26	0,070	0,64	0,95	
40	enz.(L-), autom.	2,20	0,010	0,09	0,14	
41	enz.(L-), autom.	2,23	0,045	0,41	0,61	
42	enz.(L-), autom.	2,04	-0,150	-1,36	-2,04	
44	enz.(L-), autom.	2,13	-0,060	-0,54	-0,82	
48	enz.(L-), autom.	2,30	0,110	1,00	1,50	
56	enz.(L-), autom.	2,19	0,000	0,00	0,00	
58	enz.(L-), autom.	2,23	0,040	0,36	0,54	
61	enz.(L-), autom.	2,63	0,440	4,00	5,98	(**)
64	enz.(L-) Hand	2,15	-0,040	-0,36	-0,54	
69	enz.(L-), autom.	2,27	0,080	0,73	1,09	
86	enz.(L-) Hand	2,11	-0,077	-0,70	-1,05	
88	enz.(L-), autom.	2,15	-0,035	-0,32	-0,48	
92	enz.(L-), autom.	2,19	0,000	0,00	0,00	
101	enz.(L-) Hand	2,20	0,008	0,07	0,11	

(\*\*)Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

#### 4.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,08	-0,110	-1,00	-0,50	
202	FTIR	1,95	-0,240	-2,18	-1,10	
203	FTIR	2,08	-0,110	-1,00	-0,50	
204	FTIR	1,71	-0,483	-4,39	-2,22	
205	FTIR	3,51	1,320	11,99	6,06	(*)
206	FTIR	2,07	-0,120	-1,09	-0,55	
208	FTIR	1,90	-0,290	-2,63	-1,33	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
209	FTIR	2,20	0,010	0,09	0,05	
211	FTIR	1,95	-0,240	-2,18	-1,10	
212	FTIR	3,05	0,860	7,81	3,94	
214	FTIR	2,80	0,610	5,54	2,80	
215	FTIR	1,92	-0,270	-2,45	-1,24	
216	FTIR	1,73	-0,460	-4,18	-2,11	
217	FTIR	2,24	0,050	0,45	0,23	
218	FTIR	1,84	-0,350	-3,18	-1,61	
219	FTIR	2,00	-0,190	-1,73	-0,87	
220	FTIR	1,99	-0,200	-1,82	-0,92	
221	FTIR	2,82	0,630	5,72	2,89	
222	FTIR	2,21	0,025	0,23	0,11	
223	FTIR	2,10	-0,090	-0,82	-0,41	
224	FTIR	1,59	-0,600	-5,45	-2,75	
225	FTIR	1,96	-0,230	-2,09	-1,06	
226	FTIR	2,20	0,010	0,09	0,05	
227	FTIR	1,95	-0,240	-2,18	-1,10	
228	FTIR	1,68	-0,510	-4,63	-2,34	
229	FTIR	2,01	-0,180	-1,63	-0,83	
231	FTIR	2,15	-0,040	-0,36	-0,18	
232	FTIR	2,08	-0,110	-1,00	-0,50	
234	FTIR	2,22	0,030	0,27	0,14	
236	FTIR	1,79	-0,400	-3,63	-1,83	
237	FTIR	2,00	-0,190	-1,73	-0,87	
240	FTIR	2,07	-0,120	-1,09	-0,55	
241	FTIR	1,80	-0,390	-3,54	-1,79	
242	FTIR	2,51	0,320	2,91	1,47	
243	FTIR	1,90	-0,290	-2,63	-1,33	
244	FTIR	1,55	-0,640	-5,81	-2,94	
245	FTIR	2,82	0,630	5,72	2,89	
246	FTIR	2,20	0,010	0,09	0,05	
247	FTIR	2,03	-0,160	-1,45	-0,73	
249	FTIR	1,80	-0,390	-3,54	-1,79	
250	FTIR	2,15	-0,040	-0,36	-0,18	
252	FTIR	1,55	-0,640	-5,81	-2,94	
254	FTIR	2,30	0,110	1,00	0,50	
256	FTIR	2,16	-0,030	-0,27	-0,14	
257	FTIR	2,26	0,070	0,64	0,32	
258	FTIR	1,79	-0,400	-3,63	-1,83	
259	FTIR	2,32	0,130	1,18	0,60	
260	FTIR	1,80	-0,390	-3,54	-1,79	
261	FTIR	2,10	-0,090	-0,82	-0,41	
262	FTIR	1,80	-0,390	-3,54	-1,79	
264	FTIR	1,30	-0,890	-8,08	-4,08	
265	FTIR	1,48	-0,710	-6,45	-3,26	
266	FTIR	1,72	-0,470	-4,27	-2,16	
267	FTIR	2,08	-0,110	-1,00	-0,50	
268	FTIR	2,05	-0,140	-1,27	-0,64	
269	FTIR	10,65	8,460	76,84	38,81	(*)
270	FTIR	1,70	-0,490	-4,45	-2,25	
271	FTIR	2,18	-0,010	-0,09	-0,05	
272	FTIR	2,70	0,510	4,63	2,34	
273	FTIR	1,99	-0,200	-1,82	-0,92	
274	FTIR	2,85	0,660	5,99	3,03	
275	FTIR	2,40	0,210	1,91	0,96	
276	FTIR	1,90	-0,290	-2,63	-1,33	
277	FTIR	1,61	-0,580	-5,27	-2,66	
278	FTIR	1,76	-0,430	-3,91	-1,97	
279	FTIR	1,89	-0,300	-2,72	-1,38	
280	FTIR	3,10	0,910	8,27	4,17	
281	FTIR	2,02	-0,170	-1,54	-0,78	
282	FTIR	2,61	0,420	3,81	1,93	
283	FTIR	2,60	0,410	3,72	1,88	
319	FTIR	1,70	-0,490	-4,45	-2,25	
320	FTIR	1,49	-0,700	-6,36	-3,21	
336	FTIR	1,86	-0,330	-3,00	-1,51	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
337	FTIR	1,70	-0,490	-4,45	-2,25	
349	FTIR	1,30	-0,890	-8,08	-4,08	
364	FTIR	0,80	-1,390	-12,63	-6,38	(*)

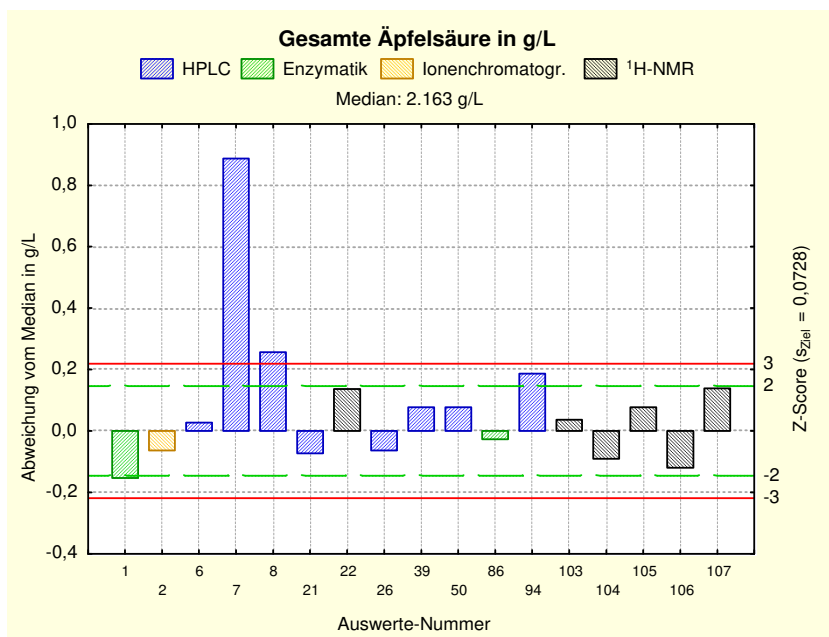
(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**4.13.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

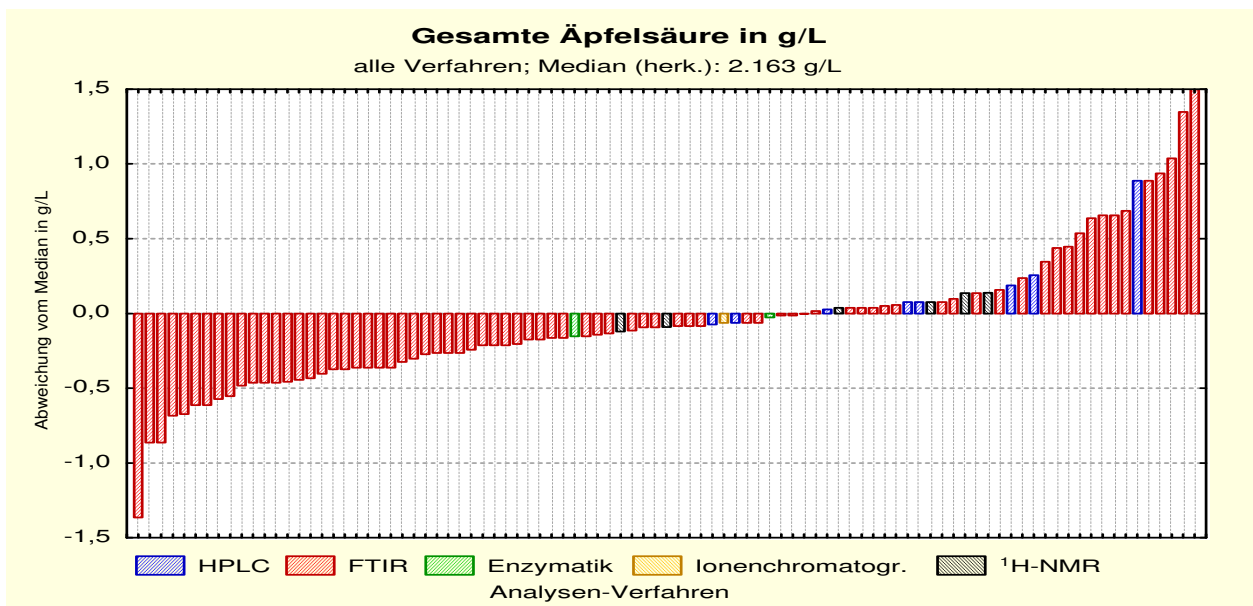
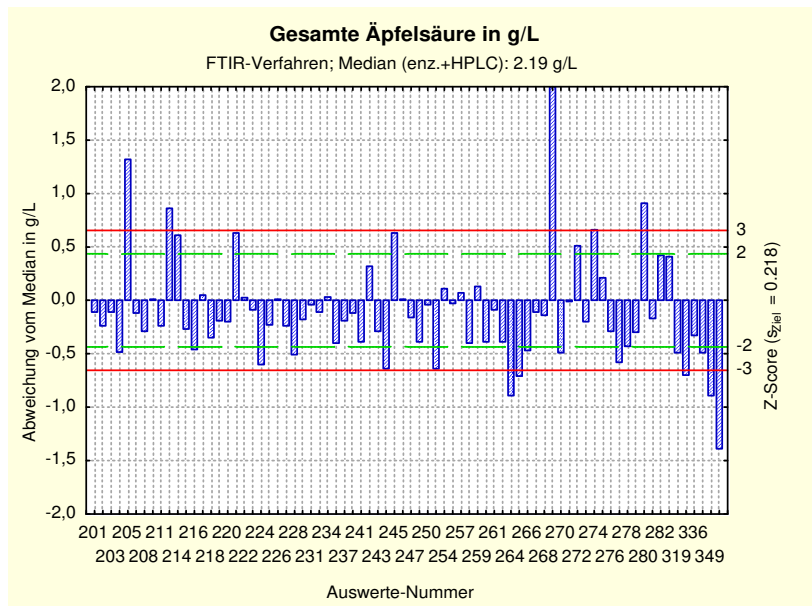
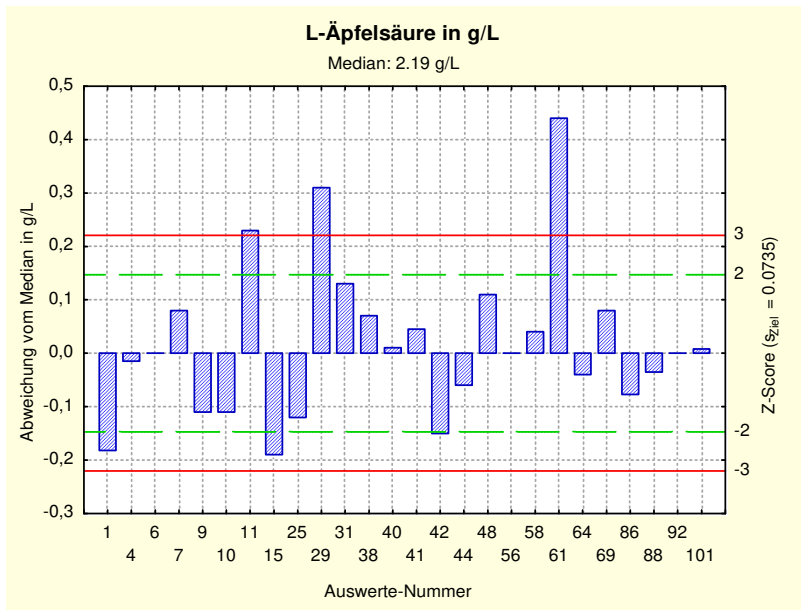
Ergebnisse in g/L	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure	
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	11	10	26	25
Minimalwert	2,01	2,01	2,00	2,00
Mittelwert	2,266	2,188	2,208	2,191
Median	2,190	2,163	2,190	2,190
Maximalwert	3,05	2,42	2,63	2,50
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,287	0,127	0,145	0,119
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,086	0,040	0,028	0,024
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,110	0,109	0,110	0,110
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )	0,074	0,073	0,074	0,074
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>FTIR</sub> )	0,218	0,218		
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,60	1,16	1,32	1,08
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )	3,90	1,74	1,98	1,62
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	1,31	0,58		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,78	0,37	0,26	0,22
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	1,18	0,55	0,39	0,32
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,40	0,18		

**4.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	8	2,270	0,176
enzymat. man.	D- und L-Äpfelsäure, manuell	2	2,073	0,101
IC	Ionenchromatographie	1	2,100	
	herkömmliche Verfahren Gesamte Äpfelsäure	11	2,208	0,158
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	2,025	0,364
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	2,193	0,127
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	21	2,218	0,131
enz.(L-) man.	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	2,114	0,072
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	26	2,192	0,123







## 4.14 Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]

### 4.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,728	0,048	1,18	
06	enzymat. autom.	0,712	0,032	0,78	
07	HPLC	0,614	-0,066	-1,62	
08	enzymat. Hand	0,670	-0,010	-0,25	
09	enzymat. Hand	0,720	0,040	0,98	
10	enzymat. autom.	0,627	-0,053	-1,30	
21	HPLC	0,390	-0,290	-7,11	(**)
22	NMR	0,610	-0,070	-1,72	
26	HPLC	<= 0			
39	HPLC	0,620	-0,060	-1,47	
50	HPLC	0,580	-0,100	-2,45	
64	enzymat. Hand	0,741	0,061	1,50	
69	enzymat. autom.	0,570	-0,110	-2,70	
86	enzymat. Hand	0,690	0,010	0,25	
88	enzymat. autom.	0,763	0,083	2,04	
94	HPLC	0,580	-0,100	-2,45	
101	enzymat. Hand	0,690	0,010	0,25	
103	NMR	0,644	-0,036	-0,88	
104	NMR	0,579	-0,101	-2,49	
105	NMR	0,637	-0,043	-1,05	
106	NMR	0,600	-0,080	-1,97	
107	NMR	0,643	-0,037	-0,91	

(\*\*) Dieser Wert bleibt bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

<= 0: Fehlerhafte Form "0" der Mitteilung eines Ergebnisses unter der Bestimmungsgrenze vom Auswerter ersetzt.  
Korrekte Form z.B. < BG (n.nn) unter Nennung des Betrages der Bestimmungsgrenze

### 4.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	0,555	0,021	0,63	0,51	
04	enz.(L-) autom.	0,525	-0,009	-0,27	-0,22	
06	enz.(L-) autom.	0,534	0,000	0,00	0,00	
09	enz.(L-) Hand	0,530	-0,004	-0,12	-0,10	
10	enz.(L-) autom.	0,467	-0,067	-2,02	-1,62	
11	enz.(L-) autom.	0,590	0,056	1,69	1,35	
15	enz.(L-) autom.	0,500	-0,034	-1,02	-0,82	
25	enz.(L-) autom.	0,570	0,036	1,08	0,87	
29	enz.(L-) autom.	0,600	0,066	1,99	1,59	
31	enz.(L-) autom.	0,550	0,016	0,48	0,39	
38	enz.(L-) autom.	0,560	0,026	0,78	0,63	
40	enz.(L-) autom.	0,630	0,096	2,89	2,32	
41	enz.(L-) autom.	0,470	-0,064	-1,93	-1,55	
42	enz.(L-) autom.	0,163	-0,371	-11,18	-8,96	(*)
44	enz.(L-) autom.	0,590	0,056	1,69	1,35	
48	enz.(L-) autom.	0,600	0,066	1,99	1,59	
56	enz.(L-) autom.	0,500	-0,034	-1,02	-0,82	
58	enz.(L-) autom.	0,510	-0,024	-0,72	-0,58	
61	enz.(L-) autom.	0,400	-0,134	-4,04	-3,24	
64	enz.(L-) Hand	0,540	0,006	0,18	0,14	
69	enz.(L-) autom.	0,448	-0,086	-2,59	-2,08	
86	enz.(L-) Hand	0,506	-0,028	-0,84	-0,68	
88	enz.(L-) autom.	0,589	0,055	1,66	1,33	
101	enz.(L-) Hand	0,489	-0,045	-1,36	-1,09	

**4.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,090	-0,580	-14,41	-2,78	
202	FTIR	-0,150	-0,820	-20,37	-3,92	
203	FTIR	-0,120	-0,790	-19,62	-3,78	
204	FTIR	-0,172	-0,842	-20,92	-4,03	
205	FTIR	0,710	0,040	0,99	0,19	
206	FTIR	1,280	0,610	15,15	2,92	
208	FTIR	1,100	0,430	10,68	2,06	
209	FTIR	0,530	-0,140	-3,48	-0,67	
211	FTIR	0,050	-0,620	-15,40	-2,97	
212	FTIR	0,860	0,190	4,72	0,91	
214	FTIR	<= 0				
215	FTIR	<= 0				
216	FTIR	<= 0				
217	FTIR	<= 0				
218	FTIR	<= 0				
219	FTIR	<= 0				
220	FTIR	0,300	-0,370	-9,19	-1,77	
221	FTIR	0,670	0,000	0,00	0,00	
222	FTIR	0,750	0,080	1,99	0,38	
223	FTIR	<= 0				
224	FTIR	0,480	-0,190	-4,72	-0,91	
225	FTIR	0,260	-0,410	-10,18	-1,96	
226	FTIR	0,500	-0,170	-4,22	-0,81	
227	FTIR	-0,320	-0,990	-24,59	-4,74	
228	FTIR	<= 0				
229	FTIR	0,070	-0,600	-14,90	-2,87	
231	FTIR	0,150	-0,520	-12,92	-2,49	
232	FTIR	-0,180	-0,850	-21,11	-4,07	
234	FTIR	<= 0				
236	FTIR	0,260	-0,410	-10,18	-1,96	
237	FTIR	<= 0				
240	FTIR	-0,070	-0,740	-18,38	-3,54	
241	FTIR	0,200	-0,470	-11,68	-2,25	
242	FTIR	0,320	-0,350	-8,69	-1,67	
243	FTIR	0,600	-0,070	-1,74	-0,33	
244	FTIR	0,390	-0,280	-6,96	-1,34	
245	FTIR	1,120	0,450	11,18	2,15	
246	FTIR	<= 0				
247	FTIR	0,180	-0,490	-12,17	-2,34	
249	FTIR	<= 0				
250	FTIR	0,240	-0,430	-10,68	-2,06	
252	FTIR	0,520	-0,150	-3,73	-0,72	
254	FTIR	-0,200	-0,870	-21,61	-4,16	
256	FTIR	0,190	-0,480	-11,92	-2,30	
257	FTIR	-0,240	-0,910	-22,61	-4,35	
258	FTIR	<= 0				
259	FTIR	0,270	-0,400	-9,94	-1,91	
260	FTIR	<= 0				
261	FTIR	0,100	-0,570	-14,16	-2,73	
262	FTIR	<= 0				
264	FTIR	<= 0				
265	FTIR	0,270	-0,400	-9,94	-1,91	
266	FTIR	0,460	-0,210	-5,22	-1,00	
267	FTIR	-0,250	-0,920	-22,85	-4,40	
268	FTIR	0,150	-0,520	-12,92	-2,49	
269	FTIR	3,320	2,650	65,83	12,68	(*)
270	FTIR	<= 0				
271	FTIR	-0,470	-1,140	-28,32	-5,45	(*)
272	FTIR	0,600	-0,070	-1,74	-0,33	
273	FTIR	-0,060	-0,730	-18,13	-3,49	
274	FTIR	1,450	0,780	19,38	3,73	
275	FTIR	-0,200	-0,870	-21,61	-4,16	
276	FTIR	-0,100	-0,770	-19,13	-3,68	

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Wert ab.

<= 0: Fehlerhafte Form "0" der Mitteilung eines Ergebnisses unter der Bestimmungsgrenze vom Auswerter ersetzt.

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
277	FTIR	<= 0				
278	FTIR	-0,370	-1,040	-25,83	-4,98	
279	FTIR	-0,110	-0,780	-19,38	-3,73	
280	FTIR	0,200	-0,470	-11,68	-2,25	
281	FTIR	1,090	0,420	10,43	2,01	
282	FTIR	0,010	-0,660	-16,40	-3,16	
283	FTIR	-0,200	-0,870	-21,61	-4,16	
319	FTIR	<= 0				
320	FTIR	0,300	-0,370	-9,19	-1,77	
336	FTIR	0,360	-0,310	-7,70	-1,48	
337	FTIR	0,400	-0,270	-6,71	-1,29	
349	FTIR	0,500	-0,170	-4,22	-0,81	
364	FTIR	<= 0				

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Wert ab.

<= 0: Fehlerhafte Form "0" der Mitteilung eines Ergebnisses unter der Bestimmungsgrenze vom Auswerter ersetzt.

**Hinweis:**

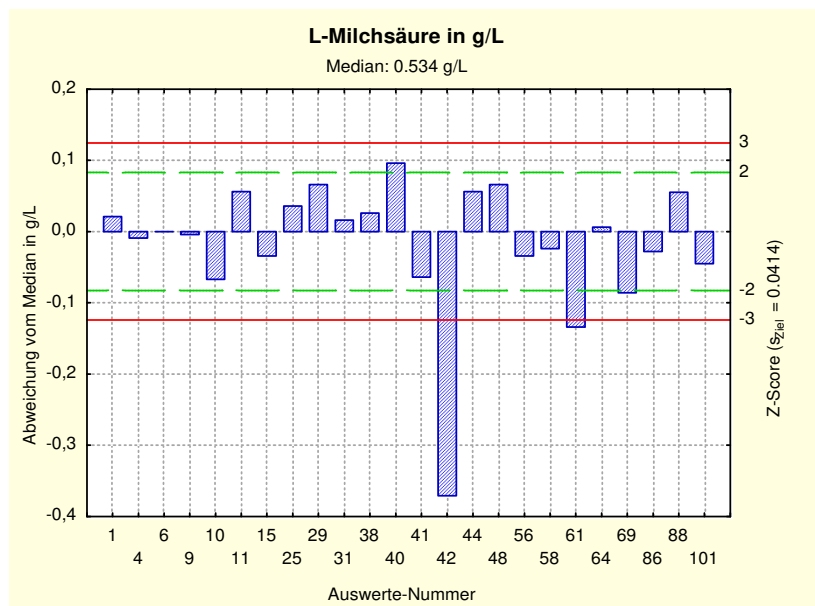
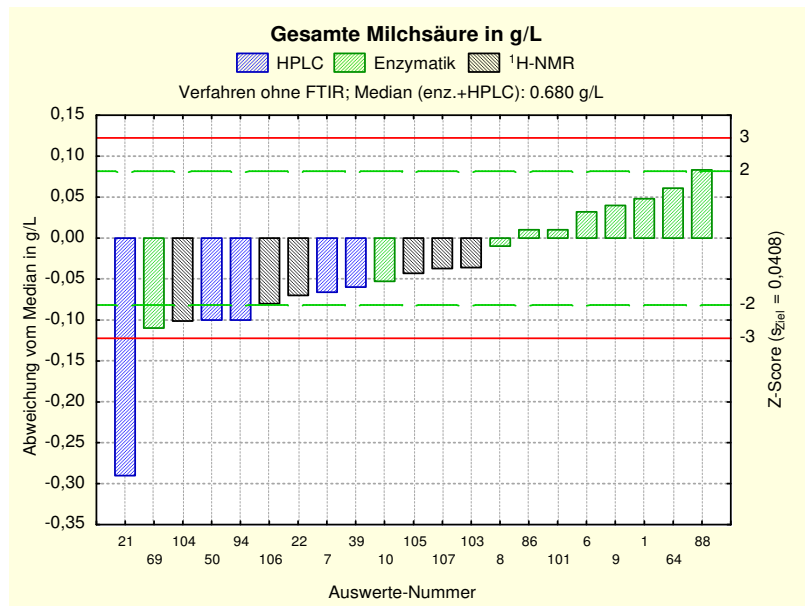
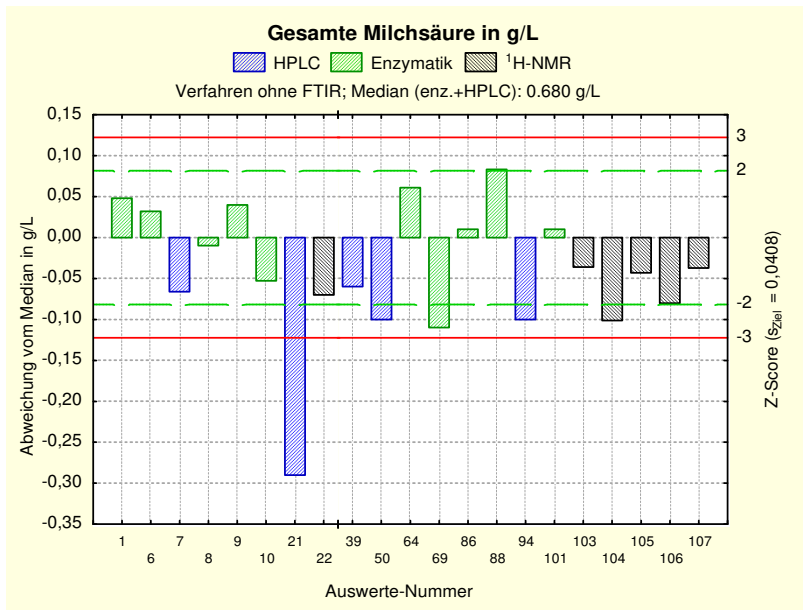
Der Gehalt an Milchsäure liegt knapp über der unteren Grenze des Anwendungsbereichs. Systematisch zu niedrige Ergebnisse der Parameterkalibrierungen führen zu Messwerten unter der Bestimmungsgrenze. (siehe Abschnitt 3.2).

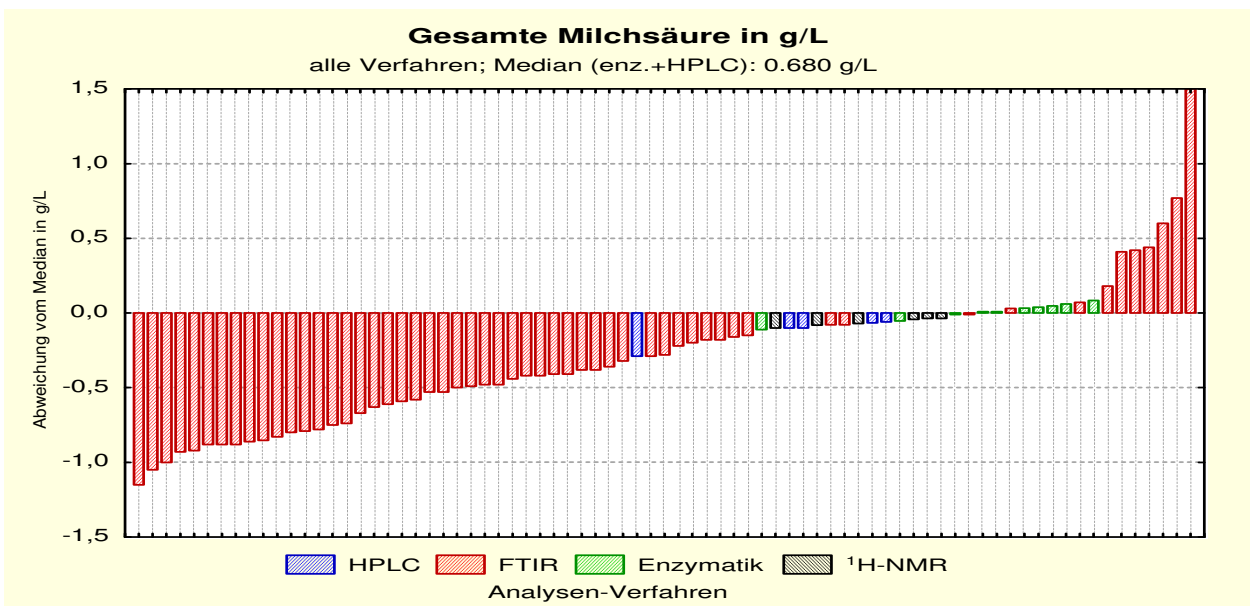
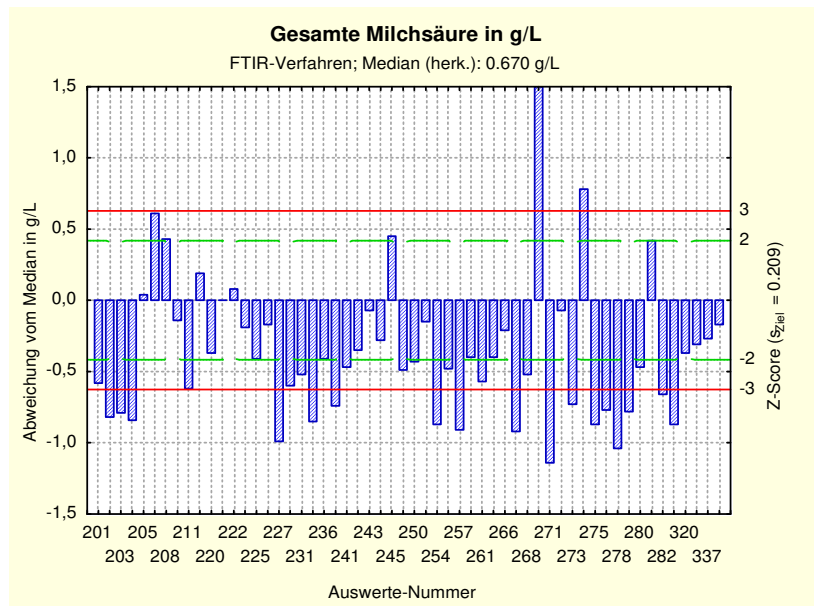
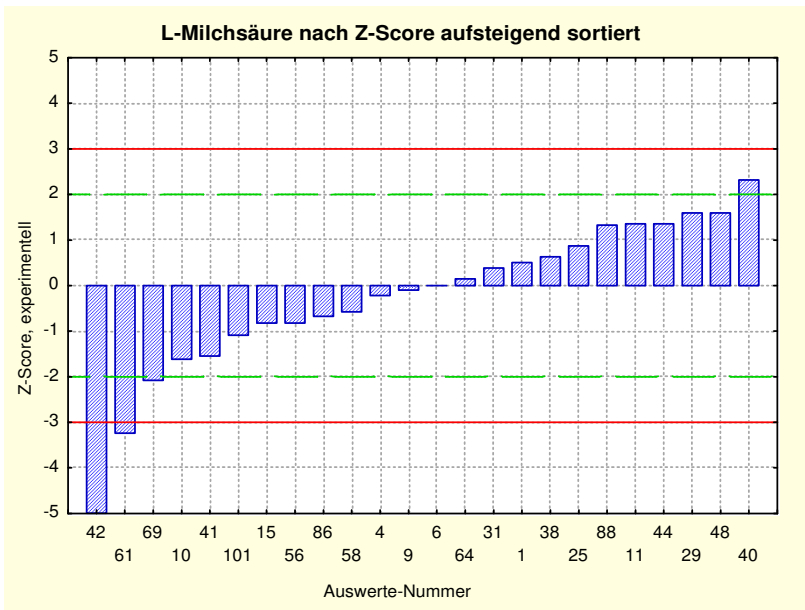
**4.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse in g/L:	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	15	14	23
Minimalwert	0,39	0,57	0,40
Mittelwert	0,646	0,665	0,533
Median	0,670	0,680	0,534
Maximalwert	0,76	0,76	0,63
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,095	0,065	0,056
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,024	0,017	0,012
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,040	0,041	0,033
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )			0,041
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\dot{U}_{FTIR}}$ )	0,209	0,209	
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,35	1,60	1,69
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )			1,36
Quotient ( $s_L/s_{\dot{U}_{FTIR}}$ )	0,45	0,31	
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,61	0,43	0,35
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )			0,28
Quotient ( $u_M/s_{\dot{U}_{FTIR}}$ )	0,12	0,08	

**4.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	5	0,5732	0,0675
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	4	0,6680	0,0977
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch manuell	6	0,7065	0,0309
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	15	0,6560	0,0808
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	56	0,2526	0,4233
NMR	$^1H$ -Kernresonanzspektroskopie	6	0,6188	0,0303
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	19	0,5303	0,0724
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	0,5240	0,0300
	alle Verfahren L-Milchsäure	24	0,5300	0,0620





## 4.15 Reduktone [mg/L]

### 4.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Glyoxal/Stärke	38,0	-10,00	-2,33	
06	Acetaldehyd/potent.	42,0	-6,00	-1,40	
14	Glyoxal/potentiometr.	46,0	-2,00	-0,47	
15	Glyoxal/Stärke	32,0	-16,00	-3,73	
17	Glyoxal/Stärke	52,0	4,00	0,93	
18	Glyoxal/potentiometr.	35,6	-12,40	-2,89	
20	Glyoxal/Stärke	55,0	7,00	1,63	
21	Glyoxal/potentiometr.	58,0	10,00	2,33	
22	Glyoxal/Stärke	38,0	-10,00	-2,33	
23	Glyoxal/Stärke	32,0	-16,00	-3,73	
25	Glyoxal/potentiometr.	56,6	8,56	2,00	
26	Propionaldehyd/Stärke	46,0	-2,00	-0,47	
28	Glyoxal/Stärke	43,0	-5,00	-1,17	
29	Glyoxal/Stärke	56,0	8,00	1,87	
31	Glyoxal/Stärke	31,0	-17,00	-3,96	
34	Glyoxal/Stärke	49,0	1,00	0,23	
36	Glyoxal/Stärke	52,0	4,00	0,93	
37	Glyoxal/Stärke	41,0	-7,00	-1,63	
38	Glyoxal/Stärke	42,0	-6,00	-1,40	
40	Glyoxal/Stärke	44,0	-4,00	-0,93	
41	Glyoxal/Stärke	39,0	-9,00	-2,10	
42	Glyoxal/Stärke	39,0	-9,00	-2,10	
44	Propionaldehyd/Stärke	51,0	3,00	0,70	
46	Glyoxal/Stärke	48,0	0,00	0,00	
48	Glyoxal/Stärke	48,0	0,00	0,00	
50	Glyoxal/potentiometr.	45,0	-3,00	-0,70	
52	Propionaldehyd/Stärke	48,0	0,00	0,00	
56	Glyoxal/MTT	49,6	1,60	0,37	
58	Glyoxal/potentiometr.	22,0	-26,00	-6,06	(*)
60	Glyoxal/potentiometr.	53,0	5,00	1,17	
61	Glyoxal/Stärke	42,0	-6,00	-1,40	
64	Glyoxal/Stärke	52,0	4,00	0,93	
66	Glyoxal/potentiometr.	47,0	-1,00	-0,23	
68	Glyoxal/potentiometr.	48,0	0,00	0,00	
69	Glyoxal/potentiometr.	53,6	5,59	1,30	
72	Glyoxal/potentiometr.	55,0	7,00	1,63	
74	Glyoxal/potentiometr.	48,8	0,80	0,19	
77	Propionaldehyd/Stärke	68,0	20,00	4,66	
78	Glyoxal/potentiometr.	48,0	0,00	0,00	
80	Glyoxal/potentiometr.	47,0	-1,00	-0,23	
83	Glyoxal/potentiometr.	67,0	19,00	4,43	
94	Glyoxal/potentiometr.	49,7	1,69	0,39	
96	Glyoxal/Stärke	21,0	-27,00	-6,30	(*)
101	Glyoxal/Stärke	49,0	1,00	0,23	

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und bleiben bei Berechnungen unberücksichtigt.

#### Anmerkung:

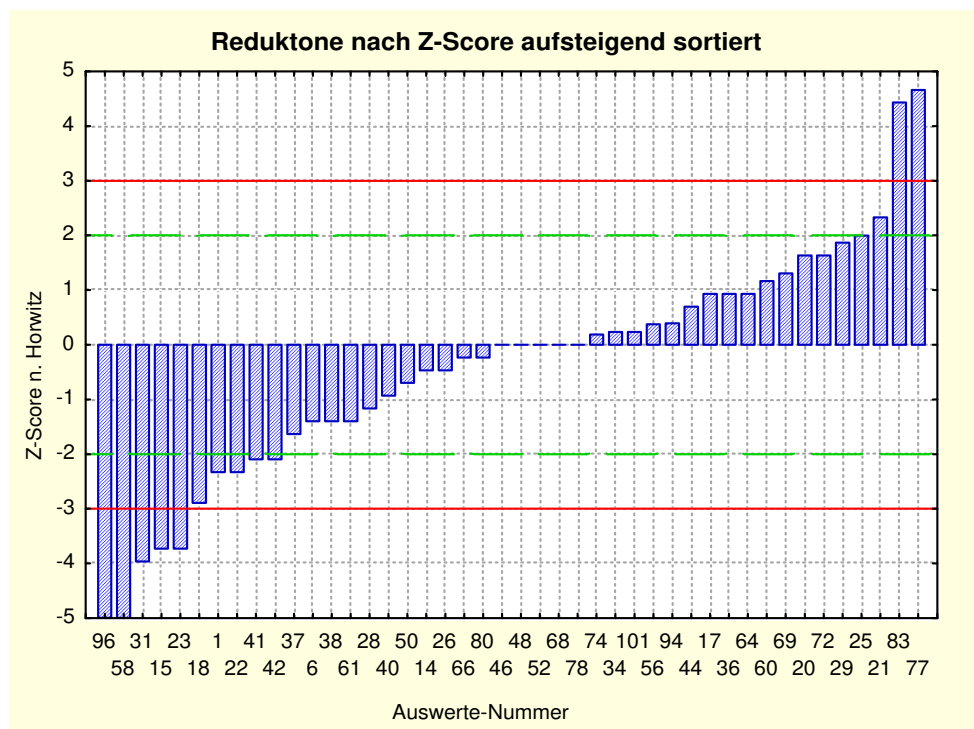
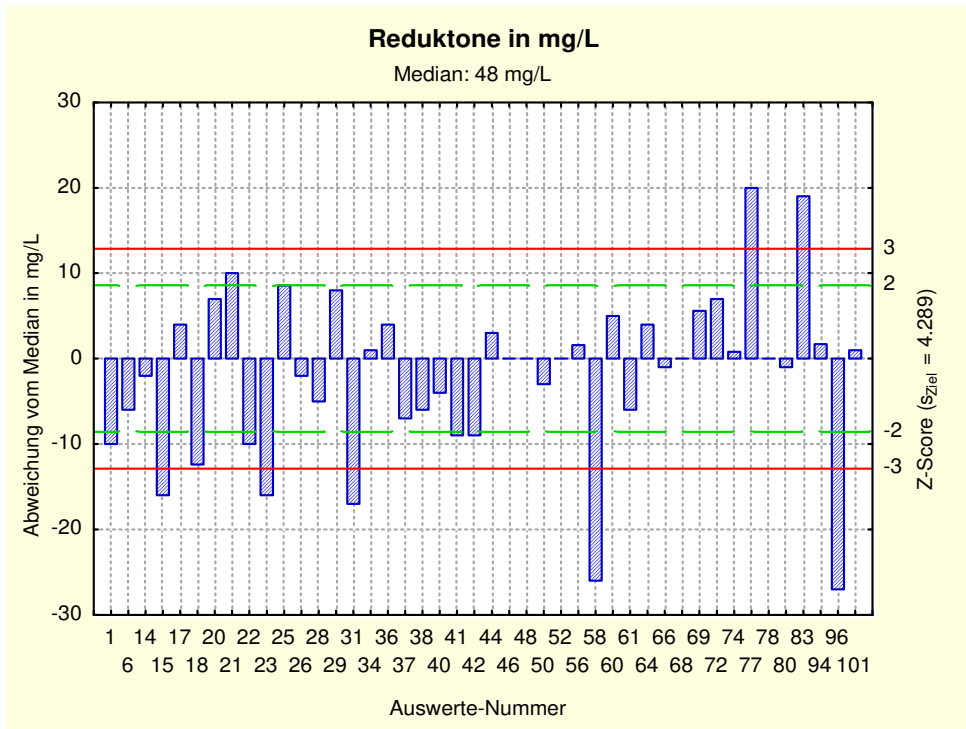
Die Bestimmung der Reduktone war erforderlich, da das Rotwein-Prüfgut Ascorbinsäure enthielt.

### 4.15.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	1	42,00	
Propionaldehyd/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	4	53,22	11,33
Glyoxal/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	22	43,25	9,00
Glyoxal/potentiometr.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	16	49,61	6,64
Glyoxal/MTT	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	49,60	
	alle Verfahren	44	46,45	8,23

**4.15.3 Deskriptive Ergebnisse**

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	42
Minimalwert	31,0
Mittelwert	47,26
Median	48,00
Maximalwert	68,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	8,157
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	1,259
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	4,289
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,90
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,29





## 4.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

### 4.16.1 Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	LwK 6.3	33,0	5,60	2,10	
06	LwK 6.2	27,4	0,00	0,00	
07	LwK 6.2	27,8	0,44	0,17	
09	LwK 6.2	26,7	-0,70	-0,26	
10	LwK 6.2	31,4	3,96	1,49	
11	LwK 6.3	20,0	-7,40	-2,78	
27	LwK 6.2	27,3	-0,10	-0,04	
44	LwK 6.3	30,0	2,60	0,98	
48	LwK 6.3	27,0	-0,40	-0,15	
53	LwK 6.3	21,0	-6,40	-2,40	
55	LwK 6.4	24,0	-3,40	-1,28	
56	LwK 6.4	25,6	-1,80	-0,68	
88	LwK 6.2	36,0	8,60	3,23	
92	LwK 6.2	31,5	4,10	1,54	
100	LwK 6.2	27,9	0,50	0,19	
206	LwK 6.5	26,0	-1,40	-0,53	
207	LwK 6.5	33,0	5,60	2,10	
209	LwK 6.5	32,0	4,60	1,73	
211	LwK 6.5	33,0	5,60	2,10	
218	LwK 6.5	34,5	7,10	2,67	
224	LwK 6.5	36,0	8,60	3,23	
237	LwK 6.5	32,0	4,60	1,73	
251	LwK 6.5	37,0	9,60	3,60	
252	LwK 6.5	36,0	8,60	3,23	
258	LwK 6.5	41,7	14,30	5,37	(*)
262	LwK 6.5	17,0	-10,40	-3,90	
263	LwK 6.5	30,0	2,60	0,98	
270	LwK 6.5	27,0	-0,40	-0,15	
319	LwK 6.5	36,0	8,60	3,23	
336	LwK 6.5	38,0	10,60	3,98	
337	LwK 6.5	32,0	4,60	1,73	
364	LwK 6.5	43,0	15,60	5,86	(*)

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Basiswerte ab.

### 4.16.2 Laborergebnisse für Freie Schweflige Säure einschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.1(incl.Red.)	55,0	-16,61	-2,76	
14	LwK 6.1(incl.Red.)	71,0	-0,61	-0,10	
15	LwK 6.1(incl.Red.)	69,0	-2,61	-0,43	
17	LwK 6.1(incl.Red.)	68,0	-3,61	-0,60	
20	LwK 6.1(incl.Red.)	77,0	5,39	0,89	
21	LwK 6.1(incl.Red.)	81,0	9,39	1,56	
22	LwK 6.1(incl.Red.)	70,0	-1,61	-0,27	
23	LwK 6.1(incl.Red.)	75,0	3,39	0,56	
25	LwK 6.1(incl.Red.)	75,5	3,91	0,65	
26	LwK 6.1(incl.Red.)	70,0	-1,61	-0,27	
28	LwK 6.1(incl.Red.)	61,0	-10,61	-1,76	
29	LwK 6.1(incl.Red.)	74,0	2,39	0,40	
31	LwK 6.1(incl.Red.)	74,0	2,39	0,40	
34	LwK 6.1(incl.Red.)	71,0	-0,61	-0,10	
36	LwK 6.1(incl.Red.)	74,0	2,39	0,40	
37	LwK 6.1(incl.Red.)	72,0	0,39	0,06	
38	LwK 6.1(incl.Red.)	66,0	-5,61	-0,93	
40	LwK 6.1(incl.Red.)	69,0	-2,61	-0,43	
41	LwK 6.1(incl.Red.)	69,0	-2,61	-0,43	
42	LwK 6.1(incl.Red.)	80,0	8,39	1,39	
46	LwK 6.1(incl.Red.)	75,0	3,39	0,56	

**Fortsetzung: Laborergebnisse jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
50	LwK 6.1 (incl.Red.)	70,0	-1,61	-0,27	
52	LwK 6.1 (incl.Red.)	68,0	-3,61	-0,60	
58	LwK 6.1 (incl.Red.)	72,0	0,39	0,06	
60	LwK 6.1 (incl.Red.)	74,0	2,39	0,40	
61	LwK 6.1 (incl.Red.)	61,0	-10,61	-1,76	
64	LwK 6.1 (incl.Red.)	72,0	0,39	0,06	
66	LwK 6.1 (incl.Red.)	69,0	-2,61	-0,43	
68	LwK 6.1 (incl.Red.)	79,0	7,39	1,23	
69	LwK 6.1 (incl.Red.)	71,6	0,00	0,00	
72	LwK 6.1 (incl.Red.)	75,0	3,39	0,56	
74	LwK 6.1 (incl.Red.)	70,0	-1,61	-0,27	
77	LwK 6.1 (incl.Red.)	73,0	1,39	0,23	
78	Redox (incl.Red.)	65,0	-6,61	-1,10	
80	LwK 6.1 (incl.Red.)	69,0	-2,61	-0,43	
83	LwK 6.1 (incl.Red.)	79,0	7,39	1,23	
96	LwK 6.1 (incl.Red.)	71,0	-0,61	-0,10	
98	LwK 6.1 (incl.Red.)	77,0	5,39	0,89	
101	LwK 6.1 (incl.Red.)	74,0	2,39	0,40	

**4.16.3 Laborergebnisse für Freie Schweflige Säure ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score SH incl. Red.	Hinweis
01	LwK 6.1 (excl.Red.)	17,0	-5,50	-2,44	-0,91	
14	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,0	2,50	1,11	0,41	
15	LwK 6.1 (excl.Red.)	37,0	14,50	6,44	2,41	
17	LwK 6.1 (excl.Red.)	16,0	-6,50	-2,88	-1,08	
20	LwK 6.1 (excl.Red.)	22,0	-0,50	-0,22	-0,08	
21	LwK 6.1 (excl.Red.)	23,0	0,50	0,22	0,08	
22	LwK 6.1 (excl.Red.)	32,0	9,50	4,22	1,58	
23	LwK 6.1 (excl.Red.)	43,0	20,50	9,10	3,40	
25	LwK 6.1 (excl.Red.)	19,0	-3,54	-1,57	-0,59	
26	LwK 6.1 (excl.Red.)	24,0	1,50	0,67	0,25	
28	LwK 6.1 (excl.Red.)	18,0	-4,50	-2,00	-0,75	
29	LwK 6.1 (excl.Red.)	18,0	-4,50	-2,00	-0,75	
31	LwK 6.1 (excl.Red.)	43,0	20,50	9,10	3,40	
34	LwK 6.1 (excl.Red.)	22,0	-0,50	-0,22	-0,08	
36	LwK 6.1 (excl.Red.)	22,0	-0,50	-0,22	-0,08	
37	LwK 6.1 (excl.Red.)	31,0	8,50	3,77	1,41	
38	LwK 6.1 (excl.Red.)	24,0	1,50	0,67	0,25	
39	LwK 6.1 (excl.Red.)	29,9	7,40	3,28	1,23	
40	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,0	2,50	1,11	0,41	
41	LwK 6.1 (excl.Red.)	30,0	7,50	3,33	1,24	
42	LwK 6.1 (excl.Red.)	41,0	18,50	8,21	3,07	
46	LwK 6.1 (excl.Red.)	27,0	4,50	2,00	0,75	
50	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,0	2,50	1,11	0,41	
52	LwK 6.1 (excl.Red.)	20,0	-2,50	-1,11	-0,41	
58	LwK 6.1 (excl.Red.)	50,0	27,50	12,21	4,56	
60	LwK 6.1 (excl.Red.)	21,0	-1,50	-0,67	-0,25	
61	LwK 6.1 (excl.Red.)	19,0	-3,50	-1,55	-0,58	
64	LwK 6.1 (excl.Red.)	20,0	-2,50	-1,11	-0,41	
66	LwK 6.1 (excl.Red.)	22,0	-0,50	-0,22	-0,08	
68	LwK 6.1 (excl.Red.)	31,0	8,50	3,77	1,41	
69	LwK 6.1 (excl.Red.)	18,0	-4,48	-1,99	-0,74	
72	LwK 6.1 (excl.Red.)	20,0	-2,50	-1,11	-0,41	
74	LwK 6.1 (excl.Red.)	21,2	-1,30	-0,58	-0,22	
77	LwK 6.1 (excl.Red.)	5,0	-17,50	-7,77	-2,90	
78	Redox (excl.Red.)	17,0	-5,50	-2,44	-0,91	
80	LwK 6.1 (excl.Red.)	22,0	-0,50	-0,22	-0,08	
83	LwK 6.1 (excl.Red.)	12,0	-10,50	-4,66	-1,74	
96	LwK 6.1 (excl.Red.)	50,0	27,50	12,21	4,56	
98	LwK 6.1 (excl.Red.)	26,0	3,50	1,55	0,58	
101	LwK 6.1 (excl.Red.)	25,0	2,50	1,11	0,41	

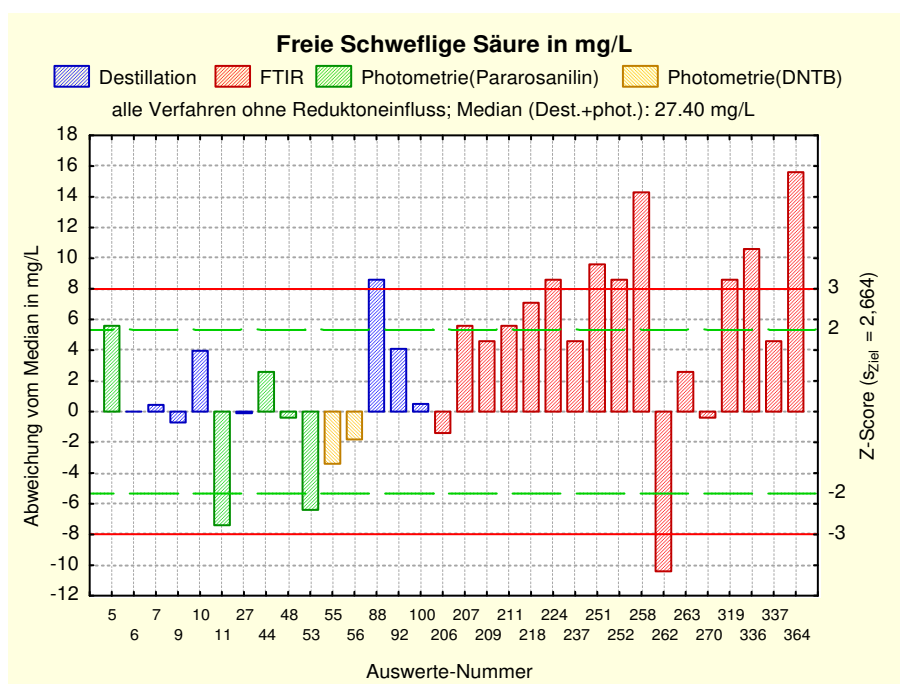
**4.16.4 Deskriptive Ergebnisse**

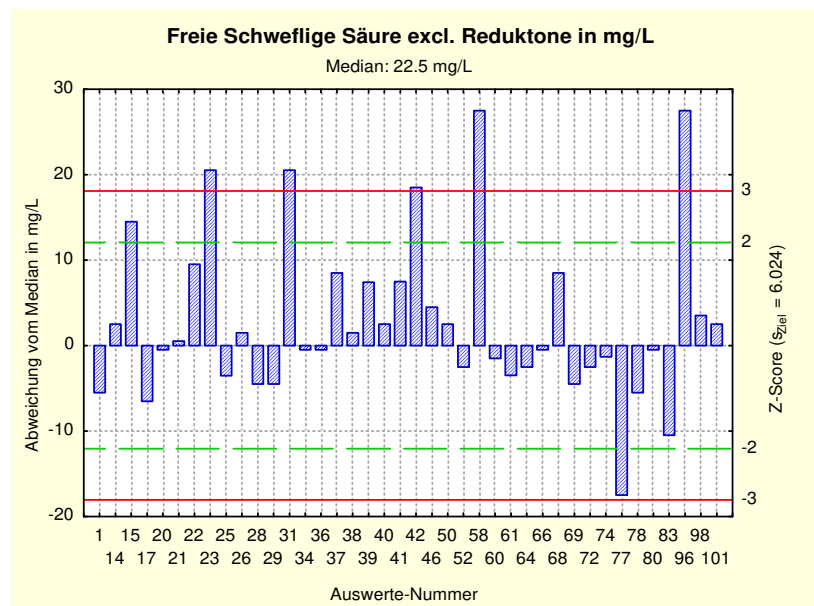
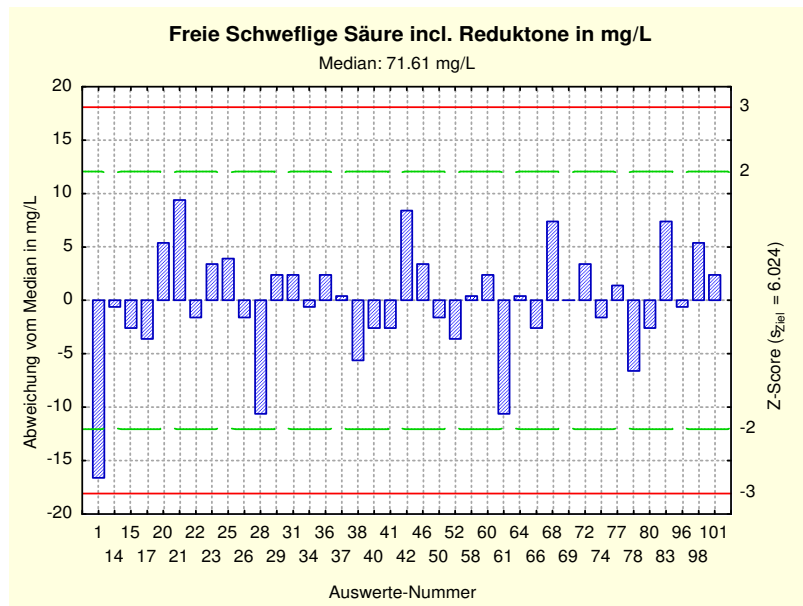
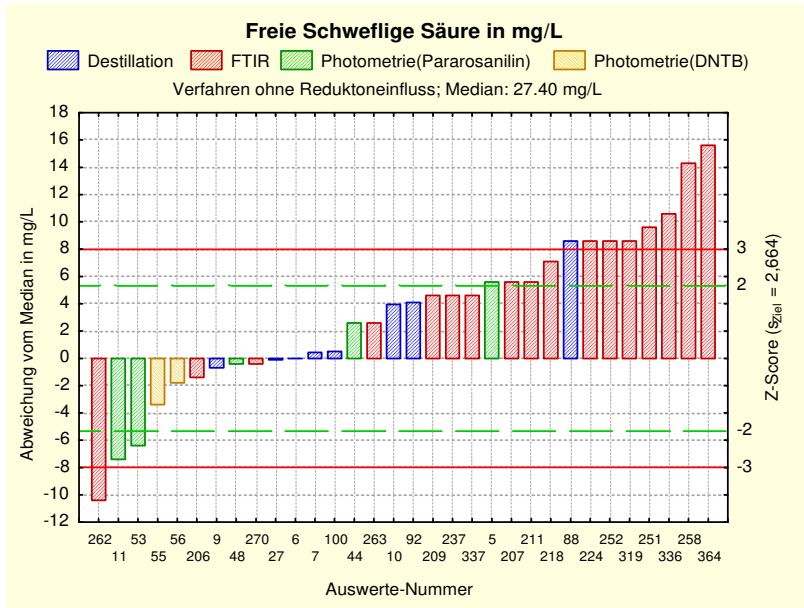
Ergebnisse für Freie Schweflige Säure in mg/L	Destillation, Photometrie	Destillation, Photometrie + FTIR	jodometrisch Reduktone	
	alle Daten	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive alle Daten
Gültige Werte	15	32	39	40
Minimalwert	20,0	17,0	55,0	5,0
Mittelwert	27,77	30,65	71,44	25,33
Median	27,40	31,43	71,61	22,50
Maximalwert	36,0	43,0	81,0	50,0
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	4,260	5,919	5,265	9,637
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	1,100	1,046	0,843	1,524
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> ) - n. Horwitz incl. Reduktone <sup>*)</sup> (s <sub>H</sub> incl. Red.)	2,664	2,993	6,024	2,253 6,024
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,60	1,98	0,87	4,28
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )				1,60
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,41	0,35	0,14	0,68
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)				0,25

<sup>\*)</sup> Zielstandardabweichung berechnet nach Horwitz aus Median der Werte inclusive Reduktone (s<sub>H</sub> incl. Red.)

**4.16.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1 (incl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B ohne Abzug der Reduktone	38	71,99	4,31
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	1	65	
	jodometrische Verfahren ohne Abzug der Reduktone	39	71,78	4,56
LwK 6.1 (excl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B mit Abzug der Reduktone	39	24,50	7,44
Redox(excl.Red.)	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	1	17,00	
		40	24,23	7,34
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	8	29,16	2,83
LwK 6.3	Pararosanilinmethode	5	26,20	6,38
LwK 6.4	DNTB-Verfahren, z.B. FOSS FIAstar	2	24,80	1,28
	Destillations- und photometrische Verfahren	15	27,75	4,40
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	17	33,62	5,42
	Destillations-, photometrische + FTIR-Verfahren	32	30,72	5,70





## 4.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

### 4.17.1 Laborergebnisse (wie mitgeteilt)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.4.2	152,0	31,00	3,30	5,79	(**)
03	LwK 7.3	132,8	11,80	1,25	2,20	
04	LwK 7.7	112,6	-8,40	-0,89	-1,57	
05	LwK 7.7	130,0	9,00	0,96	1,68	
06	LwK 7.3	124,0	3,00	0,32	0,56	
07	LwK 7.3	126,4	5,40	0,57	1,01	
08	LwK 7.4.2	115,0	-6,00	-0,64	-1,12	
09	LwK 7.3	125,6	4,60	0,49	0,86	
10	LwK 7.3	119,5	-1,48	-0,16	-0,28	
11	LwK 7.4.2	130,0	9,00	0,96	1,68	
14	LwK 7.5.1(excl. Red.)	128,0	7,00	0,74	1,31	
15	LwK 7.5.1(incl. Red.)	113,0	-8,00	-0,85	-1,49	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	157,0	36,00	3,83	6,72	(***)
20	LwK 7.4.2	127,0	6,00	0,64	1,12	
21	LwK 7.5.1(incl. Red.)	193,0	72,00	7,65	13,44	(*)
22	LwK 7.4.2m	170,0	49,00	5,21	9,15	(**)
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	163,0	42,00	4,47	7,84	(***)
25	LwK 7.4.2	125,0	4,00	0,43	0,75	
26	LwK 7.5.1(incl. Red.)	149,0	28,00	2,98	5,23	
27	LwK 7.3	126,7	5,70	0,61	1,06	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	162,0	41,00	4,36	7,65	(***)
29	LwK 7.5.1(incl. Red.)	155,0	34,00	3,61	6,35	(***)
31	LwK 7.4.1	110,0	-11,00	-1,17	-2,05	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	160,0	39,00	4,15	7,28	(***)
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	193,0	72,00	7,65	13,44	(*)
37	LwK 7.4.1	180,5	59,50	6,33	11,11	(**)
38	LwK 7.7	119,0	-2,00	-0,21	-0,37	
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	127,6	6,60	0,70	1,23	
40	LwK 7.4.1	112,0	-9,00	-0,96	-1,68	
41	LwK 7.4.1	121,0	0,00	0,00	0,00	
42	LwK 7.4.2	129,0	8,00	0,85	1,49	
44	LwK 7.4.2	123,0	2,00	0,21	0,37	
46	LwK 7.3	114,8	-6,20	-0,66	-1,16	
48	LwK 7.7	125,0	4,00	0,43	0,75	
50	LwK 7.4.2	119,0	-2,00	-0,21	-0,37	
52	LwK 7.5.2(incl. Red.)	135,0	14,00	1,49	2,61	
53	LwK 7.7	124,0	3,00	0,32	0,56	
55	LwK 7.7	116,0	-5,00	-0,53	-0,93	
56	LwK 7.7	117,7	-3,30	-0,35	-0,62	
58	LwK 7.4.2	112,0	-9,00	-0,96	-1,68	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	162,0	41,00	4,36	7,65	(***)
61	LwK 7.5.1(incl. Red.)	128,0	7,00	0,74	1,31	
64	LwK 7.4.2	112,0	-9,00	-0,96	-1,68	
66	LwK 7.5.1(incl. Red.)	140,0	19,00	2,02	3,55	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	126,0	5,00	0,53	0,93	
69	LwK 7.5.1(incl. Red.)	168,8	47,82	5,08	8,93	(***)
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	110,0	-11,00	-1,17	-2,05	
74	LwK 7.2	154,1	33,10	3,52	6,18	(**)
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	105,0	-16,00	-1,70	-2,99	
78	LwK 7.5.1(excl. Red.)	104,0	-17,00	-1,81	-3,17	
80	LwK 7.5.1(excl. Red.)	105,0	-16,00	-1,70	-2,99	
83	LwK 7.5.1(incl. Red.)	162,0	41,00	4,36	7,65	(***)
86	LwK 7.1	121,6	0,60	0,06	0,11	
87	LwK 7.3	124,0	3,00	0,32	0,56	
88	LwK 7.3	131,0	10,00	1,06	1,87	

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab.

(\*\*) Diese Werte bleiben bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

(\*\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab.

Rot markierte Methodenangaben sind wahrscheinlich fehlerhaft ausgewählt.

**Anmerkung:** Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen, die bei Anwesenheit von Ascorbinsäure einschließlich des Anteiles an Reduktionen mitgeteilt werden, sind auch bei unauffälligem Z-.Score als fachlich fehlerhaft zu bewerten.

**Fortsetzung Laborergebnisse** (wie mitgeteilt)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
89	LwK 7.4.2	123,5	2,46	0,26	0,46	
91	LwK 7.5.2(excl. Red.)	151,0	30,00	3,19	5,60	(***)
92	LwK 7.3	100,6	-20,40	-2,17	-3,81	
93	LwK 7.4.2	118,0	-3,00	-0,32	-0,56	
94	LwK 7.5.1(incl. Red.)	180,0	59,00	6,27	11,01	(***)
95	LwK 7.4.1	115,0	-6,00	-0,64	-1,12	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	178,0	57,00	6,06	10,64	(***)
97	LwK 7.7	121,1	0,05	0,01	0,01	
98	LwK 7.7	127,0	6,00	0,64	1,12	
99	LwK 7.4.1	121,0	0,00	0,00	0,00	
100	LwK 7.3	118,5	-2,50	-0,27	-0,47	
101	LwK 7.4.2	112,0	-9,00	-0,96	-1,68	
206	LwK 7.8	118,0	-3,00	-0,32	-0,56	
207	LwK 7.8	129,4	8,40	0,89	1,57	
208	FTIR(direkt)	88,0	-33,00	-3,51	-6,16	(***)
209	LwK 7.8	133,9	12,90	1,37	2,41	
211	LwK 7.8	137,0	16,00	1,70	2,99	
218	LwK 7.8	108,0	-13,00	-1,38	-2,43	
224	LwK 7.8	133,0	12,00	1,28	2,24	
237	LwK 7.8	117,0	-4,00	-0,43	-0,75	
251	LwK 7.8	128,0	7,00	0,74	1,31	
252	LwK 7.8	130,0	9,00	0,96	1,68	
258	LwK 7.8	128,0	7,00	0,74	1,31	
262	LwK 7.8	103,0	-18,00	-1,91	-3,36	
263	LwK 7.8	130,0	9,00	0,96	1,68	
270	LwK 7.8	120,0	-1,00	-0,11	-0,19	
319	LwK 7.8	116,0	-5,00	-0,53	-0,93	
336	LwK 7.8	130,0	9,00	0,96	1,68	
337	LwK 7.8	117,0	-4,00	-0,43	-0,75	
364	LwK 7.8	125,0	4,00	0,43	0,75	

(\*\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab.

**Anmerkung:** Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen, die bei Anwesenheit von Ascorbinsäure einschließlich des Anteiles an Reduktoren mitgeteilt werden, sind auch bei unauffälligem Z-Score als fachlich fehlerhaft zu bewerten.

**4.17.2 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen einschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
14	LwK 7.5.1(incl. Red.)	174,0	12,00	1,00	2,24	
15	LwK 7.5.1(incl. Red.)	113,0	-49,00	-4,07	-9,15	(**)
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	157,0	-5,00	-0,41	-0,93	
21	LwK 7.5.1(incl. Red.)	193,0	31,00	2,57	5,79	(**)
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	163,0	1,00	0,08	0,19	
26	LwK 7.5.1(incl. Red.)	149,0	-13,00	-1,08	-2,43	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	162,0	0,00	0,00	0,00	
29	LwK 7.5.1(incl. Red.)	155,0	-7,00	-0,58	-1,31	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	160,0	-2,00	-0,17	-0,37	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	193,0	31,00	2,57	5,79	(**)
52	LwK 7.5.2(incl. Red.)	135,0	-27,00	-2,24	-5,04	(**)
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	162,0	0,00	0,00	0,00	
61	LwK 7.5.1(incl. Red.)	128,0	-34,00	-2,82	-6,35	(**)
66	LwK 7.5.1(incl. Red.)	140,0	-22,00	-1,83	-4,11	
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	174,0	12,00	1,00	2,24	
69	LwK 7.5.1(incl. Red.)	168,8	6,82	0,57	1,27	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	165,0	3,00	0,25	0,56	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	173,0	11,00	0,91	2,05	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	152,0	-10,00	-0,83	-1,87	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	152,0	-10,00	-0,83	-1,87	
83	LwK 7.5.1(incl. Red.)	162,0	0,00	0,00	0,00	
91	LwK 7.5.2(incl. Red.)	183,0	21,00	1,74	3,92	
94	LwK 7.5.1(incl. Red.)	180,0	18,00	1,49	3,36	
96	LwK 7.5.1(incl. Red.)	178,0	16,00	1,33	2,99	

(\*\*) Diese Werte bleiben bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

### 4.17.3 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
14	LwK 7.5.1(excl. Red.)	128,0	19,00	2,21	3,55	
15	LwK 7.5.1(excl. Red.)	81,0	-28,00	-3,25	-5,23	(**)
17	LwK 7.5.1(excl. Red.)	105,0	-4,00	-0,46	-0,75	
21	LwK 7.5.1(excl. Red.)	135,0	26,00	3,02	4,85	
23	LwK 7.5.1(excl. Red.)	131,0	22,00	2,56	4,11	
26	LwK 7.5.1(excl. Red.)	103,0	-6,00	-0,70	-1,12	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	119,0	10,00	1,16	1,87	
29	LwK 7.5.1(excl. Red.)	99,0	-10,00	-1,16	-1,87	
34	LwK 7.5.1(excl. Red.)	111,0	2,00	0,23	0,37	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	141,0	32,00	3,72	5,97	(**)
39	LwK 7.5.1(excl. Red.)	127,6	18,60	2,16	3,47	
52	LwK 7.5.2(excl. Red.)	87,0	-22,00	-2,56	-4,11	
60	LwK 7.5.2(excl. Red.)	109,0	0,00	0,00	0,00	
61	LwK 7.5.1(excl. Red.)	86,0	-23,00	-2,67	-4,29	
66	LwK 7.5.1(excl. Red.)	93,0	-16,00	-1,86	-2,99	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	126,0	17,00	1,97	3,17	
69	LwK 7.5.1(excl. Red.)	115,2	6,23	0,72	1,16	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	110,0	1,00	0,12	0,19	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	105,0	-4,00	-0,46	-0,75	
78	LwK 7.5.1(excl. Red.)	104,0	-5,00	-0,58	-0,93	
80	LwK 7.5.1(excl. Red.)	105,0	-4,00	-0,46	-0,75	
83	LwK 7.5.1(excl. Red.)	95,0	-14,00	-1,63	-2,61	
91	LwK 7.5.2(excl. Red.)	151,0	42,00	4,88	7,84	(**)
94	LwK 7.5.1(excl. Red.)	130,3	21,31	2,48	3,98	
96	LwK 7.5.1(excl. Red.)	157,0	48,00	5,58	8,96	(**)

(\*\*) Diese Werte bleiben bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

### 4.17.4 Deskriptive Ergebnisse

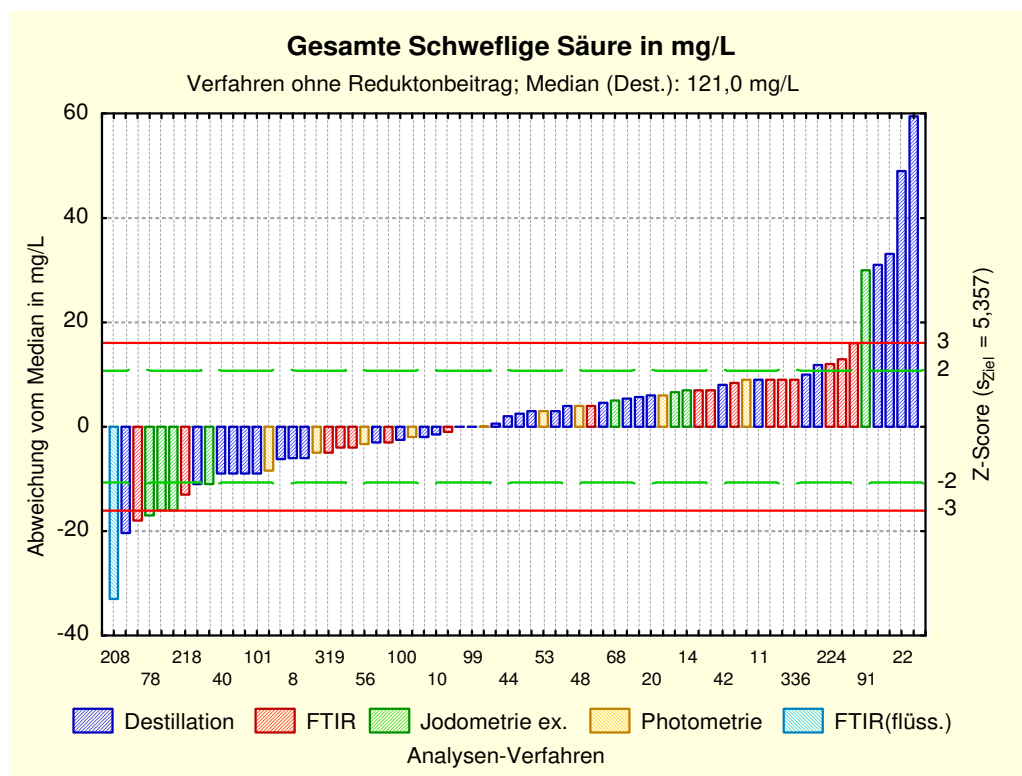
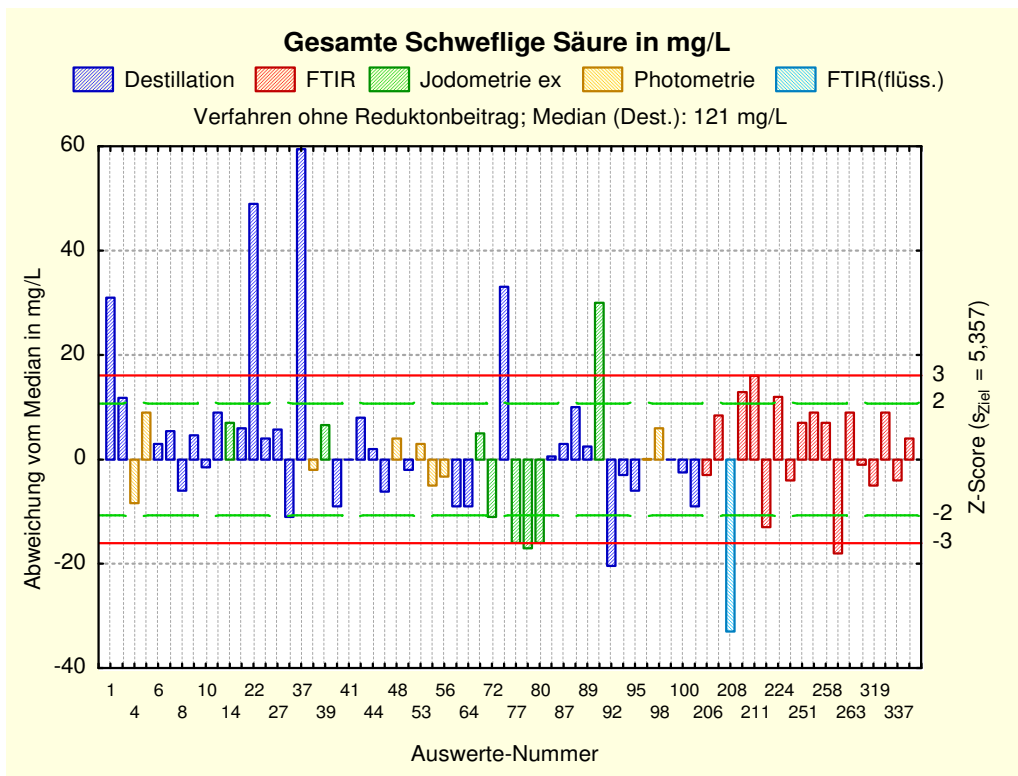
Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillationsverfahren		Jodometrie			
	alle Daten	ber. Daten	incl. Reduktone		excl. Reduktone	
			alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	33	29	24	19	25	21
Minimalwert	100,6	100,6	113,0	140,0	81,0	86,0
Mittelwert	125,65	120,34	161,33	163,67	114,17	110,67
Median	123,00	121,00	162,00	162,00	110,00	109,00
Maximalwert	180,5	132,8	193,0	183,0	157,0	135,0
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	16,605	7,387	19,353	11,461	20,038	14,780
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	2,891	1,372	3,950	2,629	4,008	3,225
Zielstandardabweichung						
- n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	9,538	9,406	12,052	12,052	8,675	8,608
- experimentell (s <sub>exp</sub> )	5,357	5,357	5,357	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,74	0,79	1,61	0,95	2,31	1,72
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	3,10	1,38	3,61	2,14	3,74	2,76
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,30	0,15	0,33	0,22	0,46	0,37
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)	0,54	0,26	0,74	0,49	0,75	0,60

### 4.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren

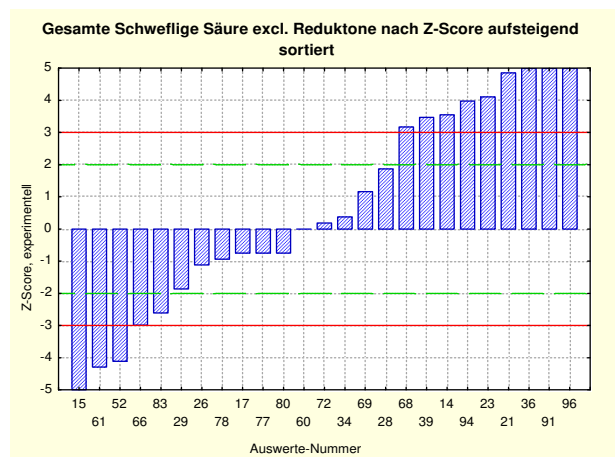
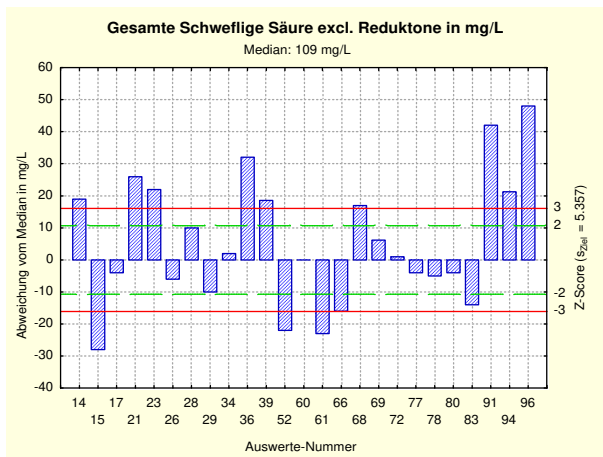
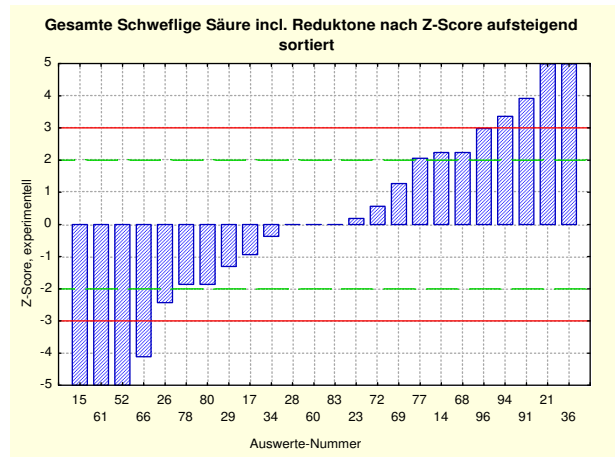
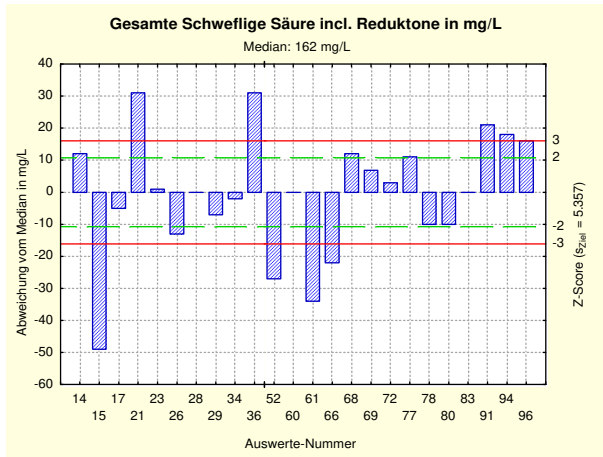
Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode nach AVV V2	1	121,60	
LwK 7.2	Methode n. Tanner	1	154,10	
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	11	123,25	7,21
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	6	118,58	9,28
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	13	121,52	8,48
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	170,00	
	Destillationsverfahren	33	122,55	9,323
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	21	162,64	17,32
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktonabzug	3	160,00	27,29
	jodometrische Verfahren ohne Reduktonabzug	24	162,27	18,72
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	22	113,46	19,66
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktonabzug	3	115,67	36,87
	jodometrische Verfahren mit Reduktonabzug	25	113,49	21,09

**Fortsetzung Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometrisch n. einf. Hydrolyse mit Reduktonabzug	22	113,46	19,66
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometrisch n. dopp. Hydrolyse mit Reduktonabzug	3	115,67	36,87
	jodometrische Verfahren mit Reduktonabzug	25	113,49	21,09
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	9	121,35	6,32
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	17	124,26	9,49
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der fl. Phase	1	88,00	







## 5 Ergebnisse zu den einzelnen Parametern der Probe FT17P05

### 5.1 Relative Dichte 20 °C/20 °C

#### 5.1.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
02	LwK 8.1	0,99735	0,000050	0,38	
04	LwK 8.4	0,99737	0,000070	0,53	
05	LwK 8.4	0,99718	-0,000120	-0,91	
06	LwK 8.4	0,99732	0,000020	0,15	
07	LwK 8.4	0,99730	0,000000	0,00	
08	LwK 8.1	0,99713	-0,000170	-1,29	
09	LwK 8.1	0,99723	-0,000070	-0,53	
10	LwK 8.4	0,99721	-0,000090	-0,68	
11	LwK 8.4	0,99757	0,000270	2,05	
14	LwK 8.4	0,99730	0,000000	0,00	
15	LwK 8.4	0,99740	0,000100	0,76	
17	LwK 8.4	0,99723	-0,000070	-0,53	
18	LwK 8.4	0,99730	0,000000	0,00	
19	LwK 8.4	0,99740	0,000100	0,76	
20	LwK 8.4	0,99732	0,000020	0,15	
21	LwK 8.4	0,99740	0,000100	0,76	
22	LwK 8.4	0,99727	-0,000030	-0,23	
23	LwK 8.4	0,99718	-0,000120	-0,91	
24	LwK 8.4	0,99726	-0,000040	-0,30	
25	LwK 8.4	0,99732	0,000020	0,15	
26	LwK 8.4	0,99720	-0,000100	-0,76	
27	LwK 8.4	0,99732	0,000020	0,15	
28	LwK 8.1	0,99740	0,000100	0,76	
29	LwK 8.4	0,99729	-0,000010	-0,08	
30	LwK 8.4	0,99721	-0,000090	-0,68	
31	LwK 8.4	0,99728	-0,000020	-0,15	
32	LwK 8.1	0,99720	-0,000100	-0,76	
34	LwK 8.4	0,99733	0,000030	0,23	
36	LwK 8.4	0,99730	0,000000	0,00	
37	LwK 8.3	0,99718	-0,000120	-0,91	
38	LwK 8.4	0,99740	0,000100	0,76	
39	LwK 8.4	0,99737	0,000070	0,53	
40	LwK 8.4	0,99725	-0,000050	-0,38	
41	LwK 8.4	0,99730	0,000000	0,00	
42	LwK 8.4	0,99732	0,000020	0,15	
44	LwK 8.1	0,99735	0,000050	0,38	
45	LwK 8.4	0,99728	-0,000020	-0,15	
46	LwK 8.4	0,99730	0,000000	0,00	
48	LwK 8.4	0,99740	0,000100	0,76	
49	LwK 8.4	0,99732	0,000020	0,15	
50	LwK 8.4	0,99732	0,000020	0,15	
52	LwK 8.4	0,99728	-0,000018	-0,14	
53	LwK 8.4	0,99750	0,000200	1,52	
54	LwK 8.4	0,99760	0,000300	2,27	
55	LwK 8.4	0,99734	0,000040	0,30	
56	LwK 8.4	0,99721	-0,000090	-0,68	
59	LwK 8.4	0,99719	-0,000110	-0,83	
60	LwK 8.4	0,99690	-0,000400	-3,03	
61	LwK 8.4	0,99740	0,000100	0,76	
62	LwK 8.3	0,99730	0,000000	0,00	
64	LwK 8.4	0,99730	0,000000	0,00	
65	LwK 8.4	0,99740	0,000100	0,76	
69	LwK 8.4	0,98554	-0,011760	-89,09	(**)
101	LwK 8.4	0,99730	0,000000	0,00	
102	LwK 8.4	0,99776	0,000460	3,48	

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

**5.1.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,99790	0,000600	3,16	
202	FTIR	0,99756	0,000260	1,37	
203	FTIR	0,99760	0,000300	1,58	
204	FTIR	0,99755	0,000250	1,32	
205	FTIR	0,99740	0,000100	0,53	
206	FTIR	0,99730	0,000000	0,00	
207	FTIR	0,99727	-0,000030	-0,16	
208	FTIR	0,99730	0,000000	0,00	
209	FTIR	0,99775	0,000450	2,37	
210	FTIR	0,99758	0,000280	1,47	
211	FTIR	0,99768	0,000380	2,00	
212	FTIR	0,99710	-0,000200	-1,05	
214	FTIR	0,99730	0,000000	0,00	
215	FTIR	0,99760	0,000300	1,58	
216	FTIR	0,99740	0,000100	0,53	
217	FTIR	0,99730	0,000000	0,00	
218	FTIR	0,99729	-0,000010	-0,05	
219	FTIR	0,99740	0,000100	0,53	
220	FTIR	0,99720	-0,000100	-0,53	
221	FTIR	0,99747	0,000170	0,89	
222	FTIR	0,99721	-0,000090	-0,47	
223	FTIR	0,99740	0,000100	0,53	
224	FTIR	0,99780	0,000500	2,63	
225	FTIR	0,99738	0,000080	0,42	
226	FTIR	0,99720	-0,000100	-0,53	
227	FTIR	0,99770	0,000400	2,11	
228	FTIR	0,99780	0,000500	2,63	
229	FTIR	0,99702	-0,000280	-1,47	
231	FTIR	0,99730	0,000000	0,00	
232	FTIR	0,99790	0,000600	3,16	
234	FTIR	0,99742	0,000120	0,63	
235	FTIR	0,99750	0,000200	1,05	
236	FTIR	0,99735	0,000050	0,26	
237	FTIR	0,99780	0,000500	2,63	
240	FTIR	0,99758	0,000280	1,47	
241	FTIR	0,99800	0,000700	3,68	
242	FTIR	0,99758	0,000280	1,47	
243	FTIR	0,99790	0,000600	3,16	
244	FTIR	0,99750	0,000200	1,05	
245	FTIR	0,99760	0,000300	1,58	
246	FTIR	0,99730	0,000000	0,00	
247	FTIR	0,99770	0,000400	2,11	
248	FTIR	0,99760	0,000300	1,58	
249	FTIR	0,99750	0,000200	1,05	
250	FTIR	0,99740	0,000100	0,53	
251	FTIR	0,99740	0,000100	0,53	
252	FTIR	0,99739	0,000090	0,47	
254	FTIR	0,99760	0,000300	1,58	
255	FTIR	0,99750	0,000200	1,05	
256	FTIR	0,99792	0,000620	3,26	
257	FTIR	0,99730	0,000000	0,00	
258	FTIR	0,99780	0,000500	2,63	
259	FTIR	0,99759	0,000290	1,53	
260	FTIR	0,99780	0,000500	2,63	
261	FTIR	0,99780	0,000500	2,63	
262	FTIR	0,99790	0,000600	3,16	
263	FTIR	0,99730	0,000000	0,00	
264	FTIR	0,99760	0,000300	1,58	
265	FTIR	0,99730	0,000000	0,00	
266	FTIR	0,99760	0,000300	1,58	
267	FTIR	0,99818	0,000880	4,63	
268	FTIR	0,99735	0,000050	0,26	
269	FTIR	0,99776	0,000460	2,42	
270	FTIR	0,99730	0,000000	0,00	
271	FTIR	0,99740	0,000100	0,53	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

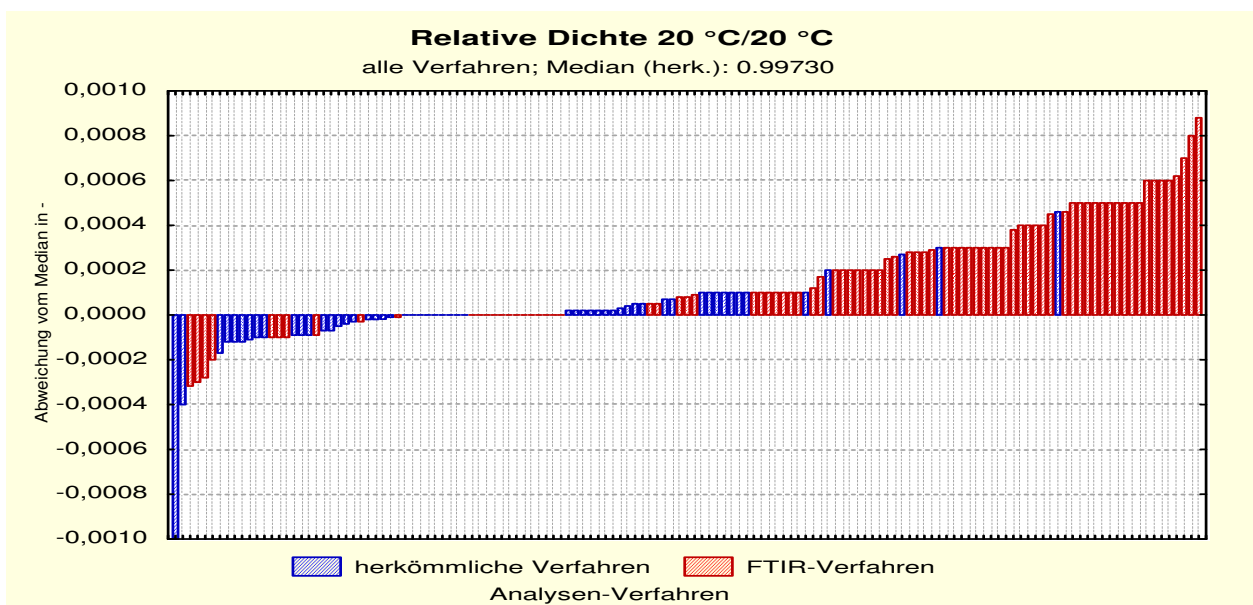
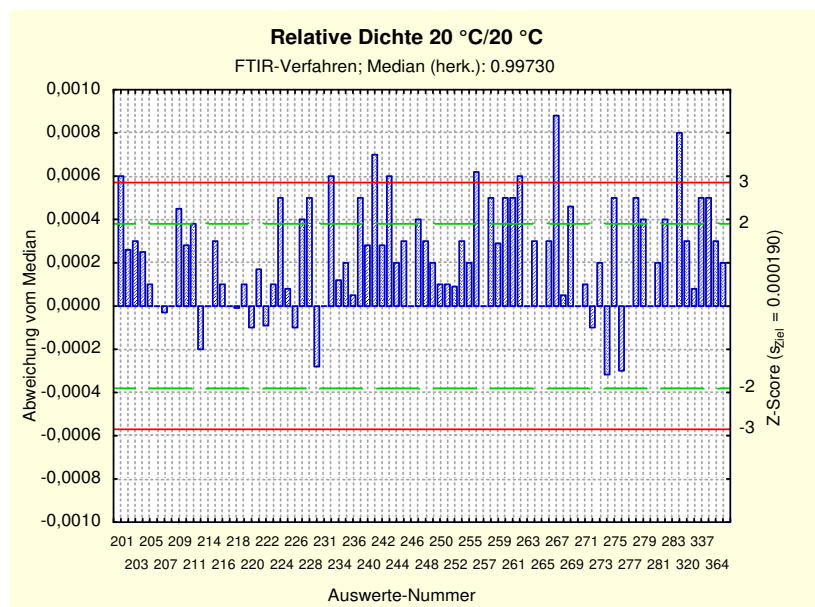
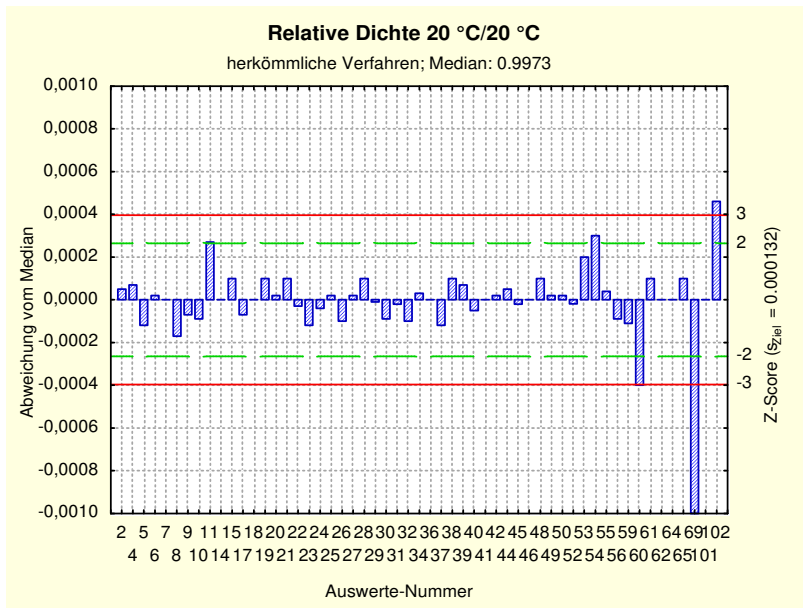
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
272	FTIR	0,99720	-0,000100	-0,53	
273	FTIR	0,99750	0,000200	1,05	
274	FTIR	0,99698	-0,000317	-1,67	
275	FTIR	0,99780	0,000500	2,63	
276	FTIR	0,99700	-0,000300	-1,58	
277	FTIR	0,99730	0,000000	0,00	
278	FTIR	0,99780	0,000500	2,63	
279	FTIR	0,99770	0,000400	2,11	
280	FTIR	0,99730	0,000000	0,00	
281	FTIR	0,99750	0,000200	1,05	
282	FTIR	0,99770	0,000400	2,11	
283	FTIR	0,99730	0,000000	0,00	
319	FTIR	0,99810	0,000800	4,21	
320	FTIR	0,99760	0,000300	1,58	
336	FTIR	0,99738	0,000080	0,42	
337	FTIR	0,99780	0,000500	2,63	
349	FTIR	0,99780	0,000500	2,63	
364	FTIR	0,99760	0,000300	1,58	
368	FTIR	0,99750	0,000200	1,05	

**5.1.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Relative Dichte 20 °C/20 °C	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	55	54
Minimalwert	0,98554	0,99690
Mittelwert	0,997098	0,997312
Median	0,997300	0,997300
Maximalwert	0,99776	0,99776
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,001592	0,000124
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,000215	0,000017
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,000132	0,000132
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,000190	0,000190
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	12,06	0,94
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	8,38	0,65
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> / s <sub>exp herk.</sub> )	1,63	0,13
Quotient (u <sub>M</sub> / s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,13	0,09

**5.1.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 8.1	Pyknometrische Methode; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2A	6	0,99728	0,000120
LwK 8.3	Hydrostatische Waage; OIV-MA-AS2-01A, Nr. 2C	2	0,99724	0,000096
LwK 8.4	Bestimmung mit dem Biegeschwinger	47	0,99731	0,000088
	herkömmliche Verfahren	55	0,99730	0,000091
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	84	0,99752	0,000257



## 5.2 Vorhandener Alkohol [g/L]

### 5.2.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	LwK 2.1	90,13	0,930	0,36	1,74	
04	LwK 2.9	89,61	0,410	0,16	0,77	
05	LwK 2.1	88,79	-0,410	-0,16	-0,77	
06	LwK 2.4	89,41	0,210	0,08	0,39	
07	LwK 2.4	88,20	-1,000	-0,39	-1,87	
08	LwK 2.1	88,86	-0,340	-0,13	-0,64	
09	LwK 2.4	89,41	0,210	0,08	0,39	
10	LwK 2.1	89,75	0,550	0,21	1,03	
11	LwK 2.4	89,20	0,000	0,00	0,00	
14	LwK 2.9	89,38	0,180	0,07	0,34	
15	LwK 2.1	89,50	0,300	0,12	0,56	
17	LwK 2.9	89,30	0,100	0,04	0,19	
18	LwK 2.7	88,00	-1,200	-0,47	-2,24	
19	LwK 2.9	88,80	-0,400	-0,16	-0,75	
20	LwK 2.7	89,06	-0,140	-0,05	-0,26	
21	LwK 2.7	88,76	-0,440	-0,17	-0,82	
22	LwK 2.9	89,40	0,200	0,08	0,37	
23	LwK 2.5	90,40	1,200	0,47	2,24	
24	LwK 2.9	89,20	0,000	0,00	0,00	
25	LwK 2.1	88,90	-0,300	-0,12	-0,56	
26	LwK 2.4	89,80	0,600	0,23	1,12	
27	LwK 2.5	88,20	-1,000	-0,39	-1,87	
28	LwK 2.4	89,90	0,700	0,27	1,31	
29	LwK 2.1	88,86	-0,340	-0,13	-0,64	
30	LwK 2.4	89,33	0,130	0,05	0,24	
31	LwK 2.9	89,30	0,100	0,04	0,19	
32	LwK 2.4	88,13	-1,070	-0,42	-2,00	
34	LwK 2.8	88,90	-0,300	-0,12	-0,56	
37	LwK 2.2	89,70	0,500	0,19	0,93	
38	LwK 2.9	89,50	0,300	0,12	0,56	
39	LwK 2.4	88,20	-1,000	-0,39	-1,87	
40	LwK 2.4	89,25	0,050	0,02	0,09	
41	LwK 2.5	88,90	-0,300	-0,12	-0,56	
42	LwK 2.4	89,00	-0,200	-0,08	-0,37	
45	LwK 2.9	88,90	-0,300	-0,12	-0,56	
46	LwK 2.5	89,20	0,000	0,00	0,00	
48	LwK 2.5	88,90	-0,300	-0,12	-0,56	
49	LwK 2.4	89,45	0,250	0,10	0,47	
50	LwK 2.9	89,70	0,500	0,19	0,93	
52	LwK 2.9	89,50	0,300	0,12	0,56	
53	LwK 2.9	88,50	-0,700	-0,27	-1,31	
55	LwK 2.1	88,63	-0,570	-0,22	-1,07	
56	LwK 2.9	89,51	0,310	0,12	0,58	
59	LwK 2.9	89,21	0,010	0,00	0,02	
60	LwK 2.1	91,20	2,000	0,78	3,74	
61	LwK 2.7	90,60	1,400	0,55	2,62	
62	LwK 2.1	88,40	-0,800	-0,31	-1,50	
64	LwK 2.5	89,13	-0,070	-0,03	-0,13	
65	LwK 2.5	89,50	0,300	0,12	0,56	
69	LwK 2.4	85,66	-3,540	-1,38	-6,62	(**)
89	LwK 2.9	89,25	0,050	0,02	0,09	
91	LwK 2.9	88,70	-0,500	-0,19	-0,93	
94	LwK 2.5	89,10	-0,100	-0,04	-0,19	
95	LwK 2.9	89,60	0,400	0,16	0,75	
98	LwK 2.9	89,00	-0,200	-0,08	-0,37	
99	LwK 2.4	88,98	-0,220	-0,09	-0,41	
101	LwK 2.5	88,90	-0,300	-0,12	-0,56	
102	LwK 2.9	85,66	-3,540	-1,38	-6,62	(***)
103	NMR	87,70	-1,500	-0,58	-2,80	(***)
104	NMR	86,05	-3,151	-1,23	-5,89	(***)
105	NMR	89,95	0,750	0,29	1,40	
106	NMR	86,60	-2,598	-1,01	-4,86	
107	NMR	84,98	-4,218	-1,64	-7,88	(***)

## 5.2.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 2.8	87,44	-1,660	-0,65	-1,87	
202	LwK 2.8	90,64	1,540	0,60	1,74	
203	LwK 2.8	88,90	-0,200	-0,08	-0,23	
204	LwK 2.8	89,40	0,300	0,12	0,34	
205	LwK 2.8	88,63	-0,468	-0,18	-0,53	
206	LwK 2.8	90,28	1,180	0,46	1,33	
207	LwK 2.8	90,42	1,320	0,51	1,49	
208	LwK 2.8	87,80	-1,300	-0,51	-1,47	
209	LwK 2.8	90,04	0,940	0,37	1,06	
210	LwK 2.8	90,15	1,050	0,41	1,19	
211	LwK 2.8	90,50	1,400	0,55	1,58	
212	LwK 2.8	89,80	0,700	0,27	0,79	
214	LwK 2.8	90,30	1,200	0,47	1,35	
215	LwK 2.8	88,60	-0,500	-0,19	-0,56	
216	LwK 2.8	90,30	1,200	0,47	1,35	
217	LwK 2.8	90,00	0,900	0,35	1,02	
218	LwK 2.8	90,30	1,200	0,47	1,35	
219	LwK 2.8	88,90	-0,200	-0,08	-0,23	
220	LwK 2.8	89,80	0,700	0,27	0,79	
221	LwK 2.8	89,50	0,400	0,16	0,45	
222	LwK 2.8	89,10	0,000	0,00	0,00	
223	LwK 2.8	89,30	0,200	0,08	0,23	
224	LwK 2.8	89,00	-0,100	-0,04	-0,11	
225	LwK 2.8	89,49	0,390	0,15	0,44	
226	LwK 2.8	89,30	0,200	0,08	0,23	
227	LwK 2.8	89,90	0,800	0,31	0,90	
228	LwK 2.8	89,00	-0,100	-0,04	-0,11	
229	LwK 2.8	90,12	1,020	0,40	1,15	
231	LwK 2.8	89,30	0,200	0,08	0,23	
232	LwK 2.8	89,20	0,100	0,04	0,11	
234	LwK 2.8	88,90	-0,200	-0,08	-0,23	
235	LwK 2.8	89,40	0,300	0,12	0,34	
236	LwK 2.8	89,60	0,500	0,19	0,56	
237	LwK 2.8	88,50	-0,600	-0,23	-0,68	
240	LwK 2.8	90,30	1,200	0,47	1,35	
241	LwK 2.8	87,80	-1,300	-0,51	-1,47	
242	LwK 2.8	89,77	0,670	0,26	0,76	
243	LwK 2.8	88,50	-0,600	-0,23	-0,68	
244	LwK 2.8	88,96	-0,140	-0,05	-0,16	
245	LwK 2.8	89,80	0,700	0,27	0,79	
246	LwK 2.8	89,00	-0,100	-0,04	-0,11	
247	LwK 2.8	88,98	-0,120	-0,05	-0,14	
248	LwK 2.8	90,49	1,390	0,54	1,57	
249	LwK 2.8	89,20	0,100	0,04	0,11	
250	LwK 2.8	89,80	0,700	0,27	0,79	
251	LwK 2.8	88,70	-0,400	-0,16	-0,45	
252	LwK 2.8	90,10	1,000	0,39	1,13	
254	LwK 2.8	90,70	1,600	0,62	1,81	
255	LwK 2.8	89,70	0,600	0,23	0,68	
256	LwK 2.8	90,40	1,300	0,51	1,47	
257	LwK 2.8	90,70	1,600	0,62	1,81	
258	LwK 2.8	89,50	0,400	0,16	0,45	
259	LwK 2.8	89,21	0,110	0,04	0,12	
260	LwK 2.8	89,00	-0,100	-0,04	-0,11	
261	LwK 2.8	88,70	-0,400	-0,16	-0,45	
262	LwK 2.8	88,80	-0,300	-0,12	-0,34	
263	LwK 2.8	89,60	0,500	0,19	0,56	
264	LwK 2.8	90,70	1,600	0,62	1,81	
265	LwK 2.8	89,70	0,600	0,23	0,68	
266	LwK 2.8	89,98	0,880	0,34	0,99	
267	LwK 2.8	88,55	-0,550	-0,21	-0,62	
268	LwK 2.8	89,85	0,750	0,29	0,85	
269	LwK 2.8	88,50	-0,600	-0,23	-0,68	
270	LwK 2.8	87,59	-1,510	-0,59	-1,70	
271	LwK 2.8	89,32	0,220	0,09	0,25	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
272	LwK 2.8	91,00	1,900	0,74	2,14	
273	LwK 2.8	88,84	-0,260	-0,10	-0,29	
274	LwK 2.8	88,32	-0,784	-0,31	-0,88	
275	LwK 2.8	90,10	1,000	0,39	1,13	
276	LwK 2.8	89,90	0,800	0,31	0,90	
277	LwK 2.8	89,69	0,587	0,23	0,66	
278	LwK 2.8	86,72	-2,380	-0,93	-2,69	
279	LwK 2.8	87,58	-1,520	-0,59	-1,72	
280	LwK 2.8	90,70	1,600	0,62	1,81	
281	LwK 2.8	89,37	0,270	0,11	0,30	
282	LwK 2.8	90,60	1,500	0,58	1,69	
283	LwK 2.8	90,40	1,300	0,51	1,47	
312	LwK 2.8	90,00	0,900	0,35	1,02	
319	LwK 2.8	88,80	-0,300	-0,12	-0,34	
320	LwK 2.8	88,40	-0,700	-0,27	-0,79	
323	LwK 2.8	91,30	2,200	0,86	2,48	
336	LwK 2.8	89,50	0,400	0,16	0,45	
337	LwK 2.8	88,60	-0,500	-0,19	-0,56	
343	LwK 2.8	89,88	0,780	0,30	0,88	
349	LwK 2.8	89,50	0,400	0,16	0,45	
364	LwK 2.8	89,90	0,800	0,31	0,90	
368	LwK 2.8	89,95	0,850	0,33	0,96	

Rot markierte Werte wurden in der Einheit %vol mitgeteilt und vom Auswerter mit dem Faktor 7,8924 umgerechnet.

**5.2.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

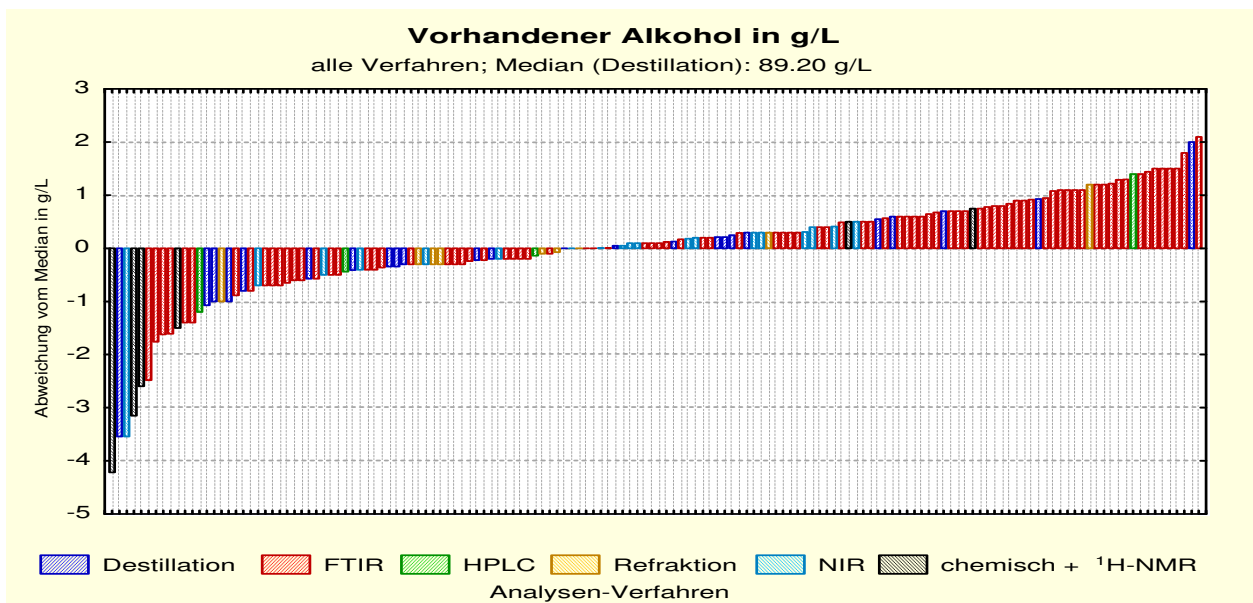
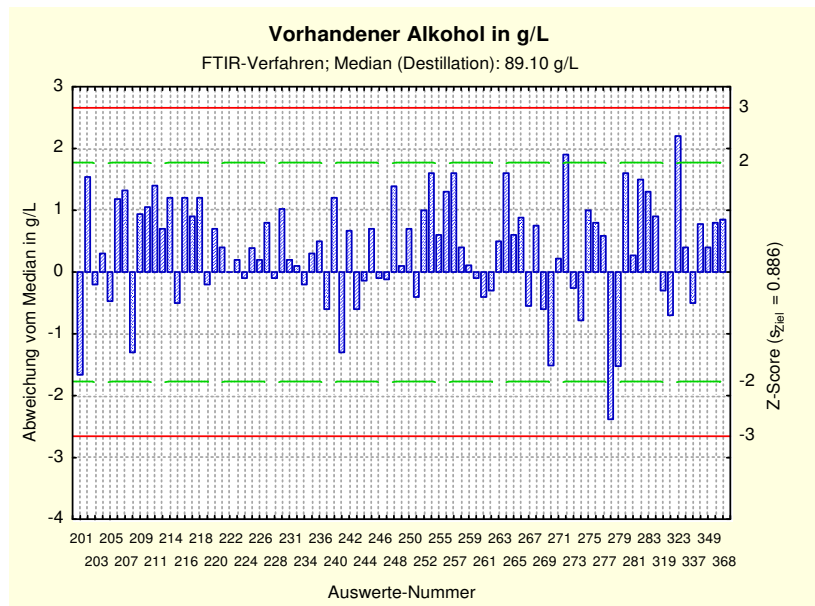
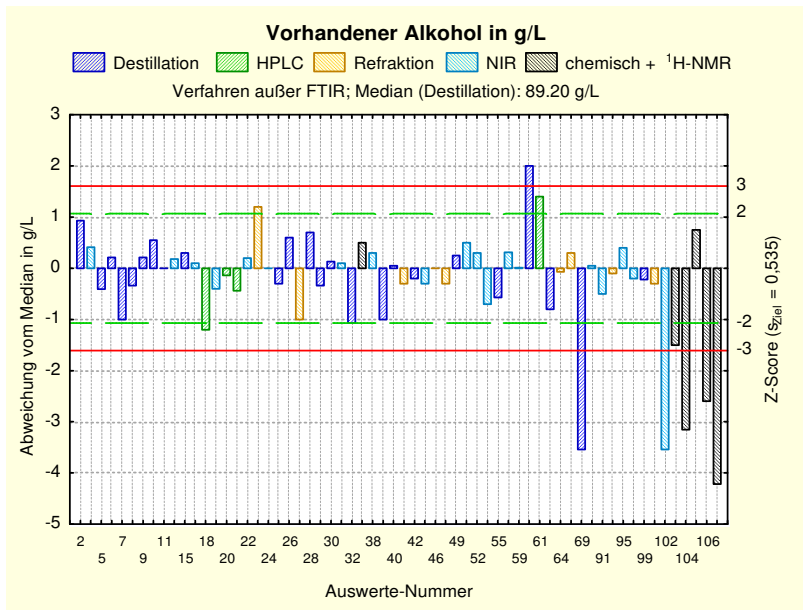
Ergebnisse für Vorhandenen Alkohol in g/L nur Destillationsverfahren	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	24	23
Minimalwert	85,66	88,13
Mittelwert	89,039	89,186
Median	89,100	89,200
Maximalwert	91,20	91,20
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,997	0,706
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,204	0,147
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,564	2,567
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,535	0,535
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{Ü\ FTIR}$ )	0,886	0,886
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,39	0,27
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,86	1,32
Quotient ( $s_L/s_{Ü\ FTIR}$ )	1,13	0,80
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,08	0,06
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,38	0,28
Quotient ( $u_M/s_{Ü\ FTIR}$ )	0,23	0,17

Der bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigte Wert ist in der Tabelle im Abschnitt 5.2.1 durch (\*\*) gekennzeichnet. Die dort durch (\*\*) gekennzeichneten Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der berücksichtigten Daten aus Destillationsverfahren ab.

**5.2.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 2.1	Destillation nach Neutralisation; OIV-MA-AS312-01A Nr. 4A oder Nr. 4B	10	89,206	0,743
LwK 2.4	Einfache direkte Destillation n. AVV V2 Destillationsverfahren	14 24	89,042 89,100	0,669 0,693
LwK 2.2	Chemische Alkoholbestimmung n. Dr. Jakob	1	89,700	
LwK 2.5	Berechnung aus relativer Dichte und Refraktion	9	89,090	0,410
LwK 2.7	HPLC n. Heidger	4	89,067	1,161
LwK 2.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	88	89,492	0,843
LwK 2.9	Nah-Infrarotspektrometrie	19	89,224	0,378
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	5	87,051	2,132





### 5.3 Gesamtextrakt [g/L]

#### 5.3.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	spezial_1	31,67	-0,13	-0,12	-0,22	
04	LwK 3.3	32,20	0,40	0,37	0,67	
06	LwK 3.3	32,00	0,20	0,19	0,34	
07	LwK 3.3	31,45	-0,35	-0,33	-0,59	
08	LwK 3.2	31,40	-0,40	-0,37	-0,67	
09	LwK 3.1	31,70	-0,10	-0,09	-0,17	
10	LwK 3.3	31,80	0,00	0,00	0,00	
11	LwK 3.3	32,50	0,70	0,65	1,18	
14	LwK 3.3	32,20	0,40	0,37	0,67	
15	LwK 3.2	32,10	0,30	0,28	0,51	
17	LwK 3.3	29,60	-2,20	-2,06	-3,70	
18	LwK 3.2	31,40	-0,40	-0,37	-0,67	
19	LwK 3.3	31,90	0,10	0,09	0,17	
20	LwK 3.3	31,80	0,00	0,00	0,00	
21	LwK 3.3	31,80	0,00	0,00	0,00	
22	LwK 3.3	31,80	0,00	0,00	0,00	
23	LwK 3.3	32,00	0,20	0,19	0,34	
24	LwK 3.3	31,70	-0,10	-0,09	-0,17	
25	LwK 3.2	31,60	-0,20	-0,19	-0,34	
26	LwK 3.3	31,73	-0,07	-0,07	-0,12	
27	LwK 3.3	31,60	-0,20	-0,19	-0,34	
28	LwK 3.1	32,40	0,60	0,56	1,01	
29	LwK 3.2	31,70	-0,10	-0,09	-0,17	
30	LwK 3.3	31,60	-0,20	-0,19	-0,34	
31	LwK 3.3	31,80	0,00	0,00	0,00	
32	LwK 3.3	31,20	-0,60	-0,56	-1,01	
34	LwK 3.3	31,80	0,00	0,00	0,00	
38	LwK 3.3	32,10	0,30	0,28	0,51	
39	LwK 3.3	31,60	-0,20	-0,19	-0,34	
40	LwK 3.3	31,60	-0,20	-0,19	-0,34	
41	LwK 3.3	31,70	-0,10	-0,09	-0,17	
42	LwK 3.3	31,80	0,00	0,00	0,00	
45	LwK 3.3	31,70	-0,10	-0,09	-0,17	
46	LwK 3.3	31,80	0,00	0,00	0,00	
48	LwK 3.3	32,00	0,20	0,19	0,34	
49	LwK 3.3	32,00	0,20	0,19	0,34	
50	LwK 3.3	32,00	0,20	0,19	0,34	
52	LwK 3.1	31,80	0,00	0,00	0,00	
53	LwK 3.3	32,10	0,30	0,28	0,51	
56	LwK 3.3	31,70	-0,10	-0,09	-0,17	
59	LwK 3.3	32,00	0,20	0,19	0,34	
60	LwK 3.2	31,50	-0,30	-0,28	-0,51	
61	LwK 3.3	32,80	1,00	0,94	1,68	
62	LwK 3.2	31,40	-0,40	-0,37	-0,67	

#### 5.3.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 3.1	Indirekt pyknometrisch n. AVV	3	31,916	0,331
LwK 3.2	Berechnung n. Tabarie auf Basis Alkohol nach LwK 2.1; OIV-MA-AS2-03B	7	31,656	0,352
LwK 3.3	Berechnung n. Tabarie auf Basis anderer Alkoholbest. herkömmliche Verfahren	33	31,837	0,255
		43	31,798	0,290
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	55	32,228	0,648
spezial_1	Berechnung nach Tabarie, Messung mit DR Gerät	1	31,670	

## 5.3.3 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	31,18	-0,62	-0,58	-1,04	
202	FTIR	32,34	0,54	0,51	0,91	
203	FTIR	33,00	1,20	1,12	2,02	
204	FTIR	33,00	1,20	1,12	2,02	
206	FTIR	32,04	0,24	0,22	0,40	
209	FTIR	33,40	1,60	1,50	2,69	
211	FTIR	32,70	0,90	0,84	1,52	
215	FTIR	32,00	0,20	0,19	0,34	
216	FTIR	32,68	0,88	0,82	1,48	
217	FTIR	32,10	0,30	0,28	0,51	
218	FTIR	31,50	-0,30	-0,28	-0,51	
219	FTIR	32,60	0,80	0,75	1,35	
220	FTIR	31,50	-0,30	-0,28	-0,51	
221	FTIR	35,10	3,30	3,09	5,56	(**)
223	FTIR	32,60	0,80	0,75	1,35	
225	FTIR	31,52	-0,28	-0,26	-0,47	
226	FTIR	32,30	0,50	0,47	0,84	
227	FTIR	32,08	0,28	0,26	0,47	
228	FTIR	32,50	0,70	0,65	1,18	
232	FTIR	32,78	0,98	0,92	1,65	
235	FTIR	31,90	0,10	0,09	0,17	
236	FTIR	32,71	0,91	0,85	1,53	
237	FTIR	32,60	0,80	0,75	1,35	
240	FTIR	32,70	0,90	0,84	1,52	
246	FTIR	32,30	0,50	0,47	0,84	
247	FTIR	32,06	0,26	0,24	0,44	
249	FTIR	32,50	0,70	0,65	1,18	
251	FTIR	32,50	0,70	0,65	1,18	
252	FTIR	31,77	-0,03	-0,03	-0,05	
254	FTIR	32,50	0,70	0,65	1,18	
258	FTIR	32,00	0,20	0,19	0,34	
259	FTIR	32,00	0,20	0,19	0,34	
260	LwK 3.2	33,10	1,30	1,22	2,19	
261	FTIR	32,50	0,70	0,65	1,18	
262	FTIR	32,30	0,50	0,47	0,84	
263	FTIR	31,60	-0,20	-0,19	-0,34	
264	FTIR	32,40	0,60	0,56	1,01	
266	FTIR	31,60	-0,20	-0,19	-0,34	
267	FTIR	33,55	1,75	1,64	2,95	
268	FTIR	31,35	-0,45	-0,42	-0,76	
269	FTIR	31,70	-0,10	-0,09	-0,17	
270	FTIR	31,50	-0,30	-0,28	-0,51	
271	FTIR	32,26	0,46	0,43	0,77	
272	FTIR	31,60	-0,20	-0,19	-0,34	
273	FTIR	31,64	-0,16	-0,15	-0,27	
275	FTIR	33,20	1,40	1,31	2,36	
276	FTIR	40,30	8,50	7,95	14,31	(**)
278	FTIR	31,43	-0,37	-0,35	-0,62	
279	FTIR	31,21	-0,59	-0,55	-0,99	
280	FTIR	31,00	-0,80	-0,75	-1,35	
281	FTIR	32,24	0,44	0,41	0,74	
282	FTIR	32,00	0,20	0,19	0,34	
283	FTIR	32,50	0,70	0,65	1,18	
320	FTIR	31,70	-0,10	-0,09	-0,17	
336	FTIR	32,91	1,11	1,04	1,87	
337	FTIR	32,70	0,90	0,84	1,52	

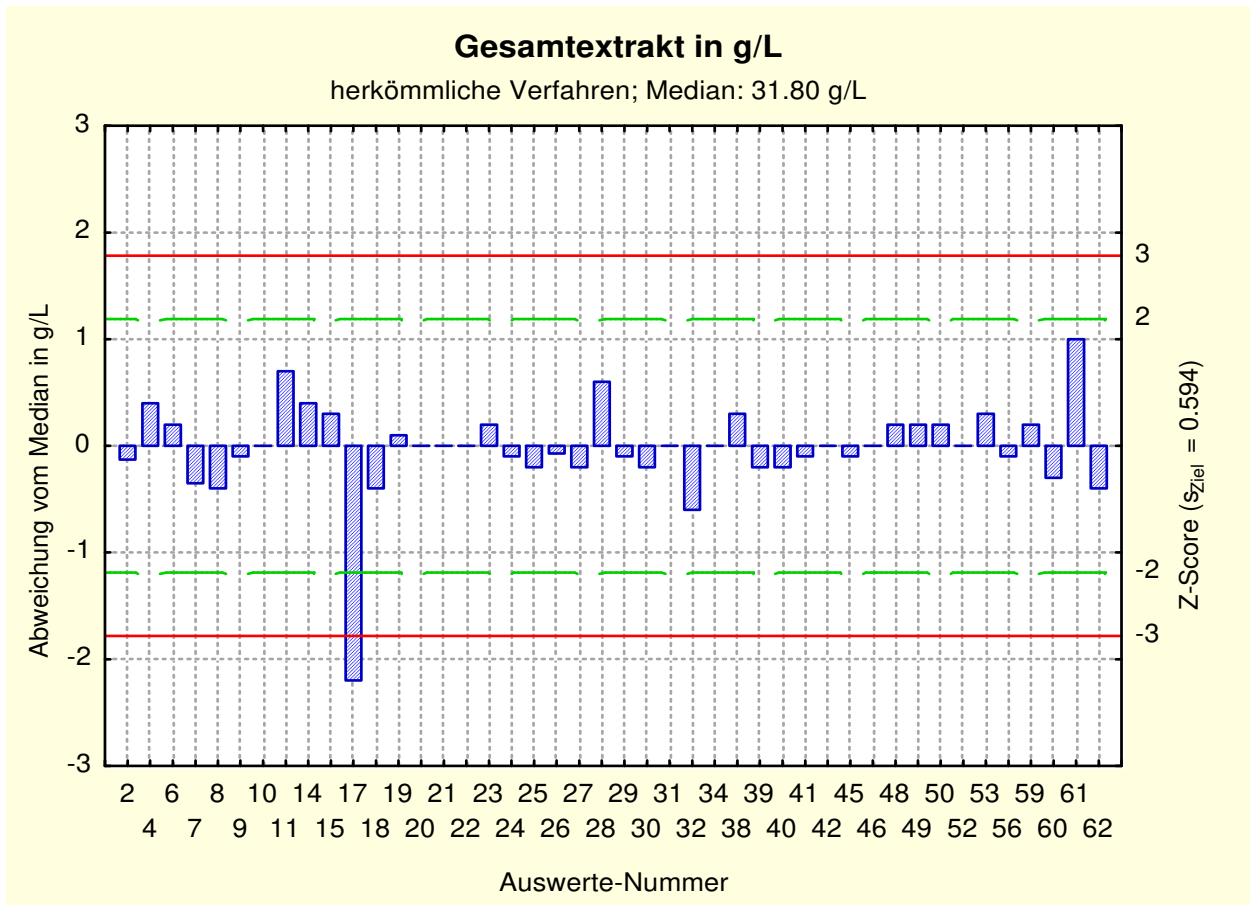
(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

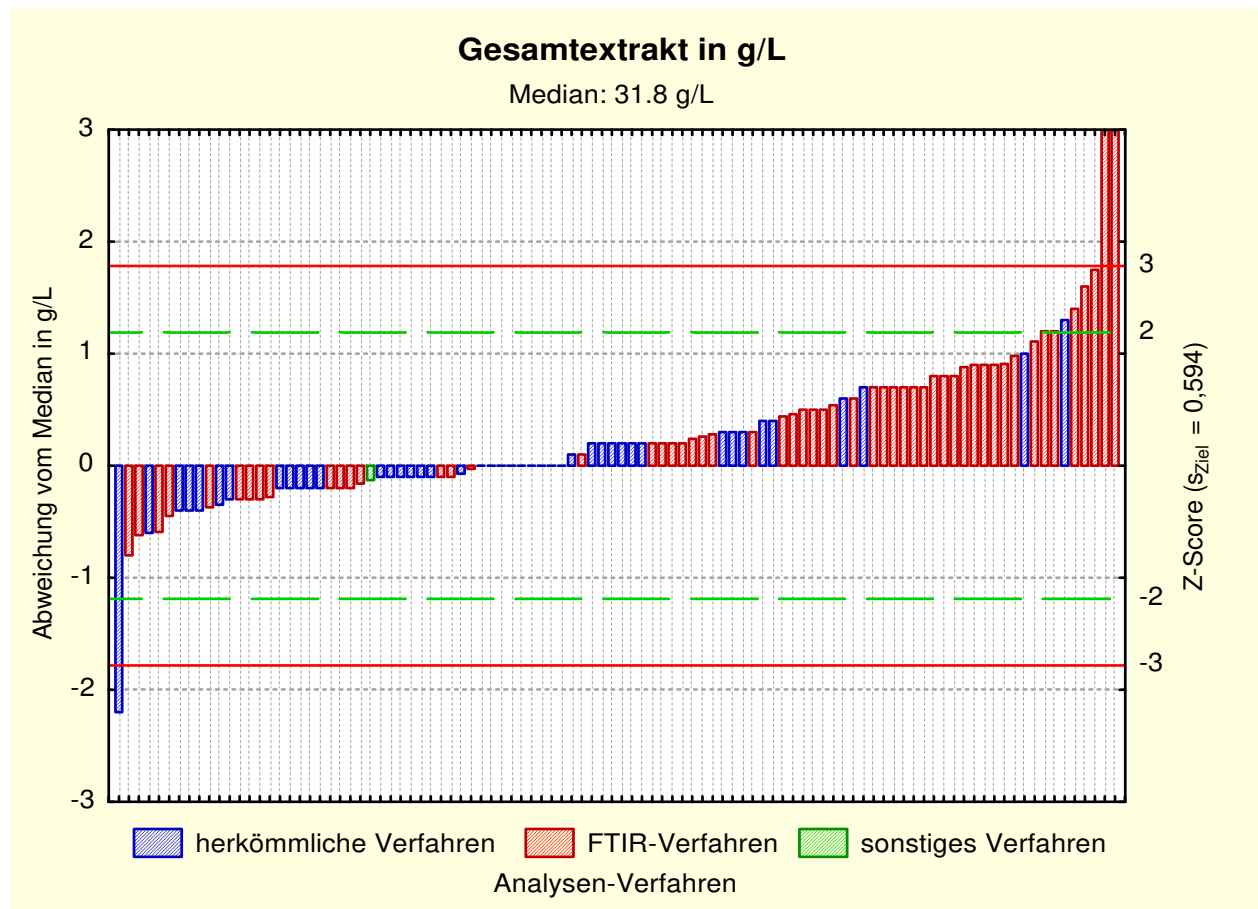
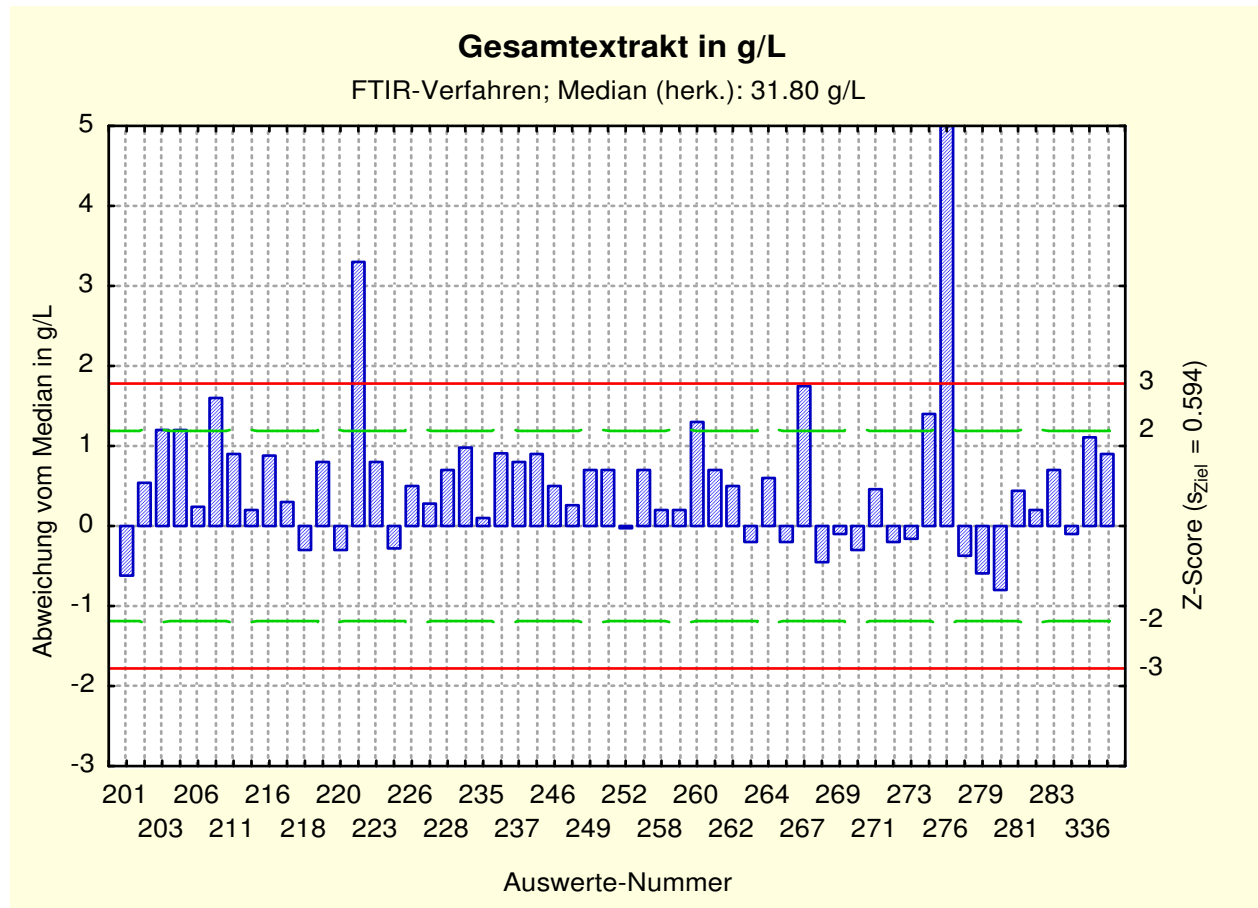
Rot LwK 3.2: Fehlerhafte Kodierung. Der Code ist der Bestimmung des Alkohols nach LwK 2.1 vorbehalten.

**5.3.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Gesamtextrakt [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	43
Minimalwert	29,6
Mittelwert	31,78
Median	31,80
Maximalwert	32,8
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,458
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,070
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	1,069
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,594
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(0,565)
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,43
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,77
Quotient ( $s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(0,81)
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,07
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,12
Quotient ( $u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	(0,12)

<sup>1)</sup> Die FTIR-Laboreergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung  $s_{exp\ herk}$  bewertet.





## 5.4 Vergärbare Zucker [g/L]

### 5.4.1 Herkömmliche Laborergebnisse

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
04	LwK 4.5	14,34	0,345	0,65	0,82	
06	LwK 4.5	14,20	0,210	0,39	0,50	
07	LwK 4.5	13,71	-0,280	-0,53	-0,67	
08	LwK 4.5	13,98	-0,010	-0,02	-0,02	
09	LwK 4.5	13,86	-0,130	-0,24	-0,31	
10	LwK 4.5	13,44	-0,550	-1,03	-1,31	
11	LwK 4.1	13,90	-0,090	-0,17	-0,21	
14	LwK 4.5	14,1	0,110	0,21	0,26	
15	LwK 4.5	13,8	-0,190	-0,36	-0,45	
18	LwK 4.7	14,40	0,410	0,77	0,97	
19	LwK 4.4	13,40	-0,590	-1,11	-1,40	
20	LwK 4.7	14,51	0,520	0,98	1,24	
21	LwK 4.7	14,16	0,170	0,32	0,40	
22	NMR	14,20	0,210	0,39	0,50	
23	LwK 4.4	14,50	0,510	0,96	1,21	
24	LwK 4.4	14,00	0,010	0,02	0,02	
25	LwK 4.5	13,94	-0,050	-0,09	-0,12	
26	LwK 4.7	14,32	0,330	0,62	0,78	
27	LwK 4.4	14,60	0,610	1,15	1,45	
28	LwK 4.4	13,80	-0,190	-0,36	-0,45	
29	LwK 4.5	13,60	-0,390	-0,73	-0,93	
30	LwK 4.7	14,80	0,810	1,52	1,93	
31	LwK 4.5	14,10	0,110	0,21	0,26	
32	LwK 4.4	13,70	-0,290	-0,55	-0,69	
34	LwK 4.8	13,70	-0,290	-0,55	-0,69	
37	LwK 4.3	13,29	-0,700	-1,32	-1,66	
38	LwK 4.5	14,60	0,610	1,15	1,45	
39	LwK 4.7	13,76	-0,230	-0,43	-0,55	
40	LwK 4.5	13,80	-0,190	-0,36	-0,45	
41	LwK 4.5	14,24	0,250	0,47	0,59	
42	LwK 4.7	14,10	0,110	0,21	0,26	
44	LwK 4.5	13,59	-0,400	-0,75	-0,95	
45	LwK 4.5	13,20	-0,790	-1,48	-1,88	
46	LwK 4.5	14,50	0,510	0,96	1,21	
48	LwK 4.5	14,40	0,410	0,77	0,97	
49	LwK 4.4	12,70	-1,290	-2,42	-3,07	
50	LwK 4.7	14,16	0,170	0,32	0,40	
52	LwK 4.5	13,64	-0,350	-0,66	-0,83	
53	LwK 4.5	13,70	-0,290	-0,55	-0,69	
55	LwK 4.5	13,70	-0,290	-0,55	-0,69	
56	LwK 4.5	13,87	-0,120	-0,23	-0,29	
59	LwK 4.7	13,50	-0,490	-0,92	-1,16	
60	LwK 4.4	15,83	1,840	3,46	4,37	
61	LwK 4.7	14,00	0,010	0,02	0,02	
62	LwK 4.4	13,90	-0,090	-0,17	-0,21	
64	LwK 4.4	14,25	0,260	0,49	0,62	
77	LwK 4.4	13,54	-0,450	-0,85	-1,07	
92	LwK 4.5	13,48	-0,510	-0,96	-1,21	
94	LwK 4.7	14,40	0,410	0,77	0,97	
101	LwK 4.4	14,30	0,310	0,58	0,74	
103	NMR	12,80	-1,190	-2,24	-2,83	
104	NMR	12,76	-1,233	-2,32	-2,93	
105	NMR	13,93	-0,060	-0,11	-0,14	
106	NMR	12,41	-1,579	-2,97	-3,75	
107	NMR	14,43	0,444	0,84	1,06	

**5.4.2 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker**

(Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; verbindliche Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	15,50	1,510	2,84	2,59	
203	LwK 4.8	14,07	0,080	0,15	0,14	
204	LwK 4.8	13,43	-0,560	-1,05	-0,96	
206	LwK 4.8	13,58	-0,410	-0,77	-0,70	
207	LwK 4.8	14,10	0,110	0,21	0,19	
208	LwK 4.8	14,20	0,210	0,39	0,36	
209	LwK 4.8	14,07	0,080	0,15	0,14	
210	LwK 4.8	13,45	-0,540	-1,01	-0,92	
211	LwK 4.8	13,37	-0,620	-1,17	-1,06	
212	LwK 4.8	13,67	-0,320	-0,60	-0,55	
214	LwK 4.8	13,30	-0,690	-1,30	-1,18	
215	LwK 4.8	13,34	-0,650	-1,22	-1,11	
216	LwK 4.8	12,25	-1,740	-3,27	-2,98	
217	LwK 4.8	12,83	-1,160	-2,18	-1,99	
218	LwK 4.8	13,30	-0,690	-1,30	-1,18	
220	LwK 4.8	15,04	1,050	1,97	1,80	
221	LwK 4.8	14,87	0,880	1,65	1,51	
222	LwK 4.8	14,39	0,400	0,75	0,68	
223	LwK 4.8	14,50	0,510	0,96	0,87	
224	LwK 4.8	13,86	-0,130	-0,24	-0,22	
225	LwK 4.8	13,78	-0,210	-0,39	-0,36	
226	LwK 4.8	12,90	-1,090	-2,05	-1,87	
227	LwK 4.8	14,47	0,480	0,90	0,82	
228	LwK 4.8	14,28	0,290	0,55	0,50	
229	LwK 4.8	13,01	-0,980	-1,84	-1,68	
232	LwK 4.8	13,32	-0,670	-1,26	-1,15	
234	LwK 4.8	13,66	-0,330	-0,62	-0,57	
235	LwK 4.8	14,90	0,910	1,71	1,56	
236	LwK 4.8	13,07	-0,920	-1,73	-1,58	
237	LwK 4.8	13,80	-0,190	-0,36	-0,33	
240	LwK 4.8	15,01	1,020	1,92	1,75	
241	LwK 4.8	13,70	-0,290	-0,55	-0,50	
242	LwK 4.8	14,49	0,500	0,94	0,86	
243	LwK 4.8	14,90	0,910	1,71	1,56	
244	LwK 4.8	13,43	-0,560	-1,05	-0,96	
245	LwK 4.8	13,66	-0,330	-0,62	-0,57	
246	LwK 4.8	14,10	0,110	0,21	0,19	
247	LwK 4.8	13,02	-0,970	-1,82	-1,66	
248	LwK 4.8	12,91	-1,080	-2,03	-1,85	
249	LwK 4.8	14,80	0,810	1,52	1,39	
250	LwK 4.8	12,81	-1,180	-2,22	-2,02	
251	LwK 4.8	13,22	-0,770	-1,45	-1,32	
252	LwK 4.8	14,10	0,110	0,21	0,19	
254	LwK 4.8	14,40	0,410	0,77	0,70	
255	LwK 4.8	12,20	-1,790	-3,36	-3,07	
256	LwK 4.8	15,30	1,310	2,46	2,24	
257	LwK 4.8	13,06	-0,930	-1,75	-1,59	
258	LwK 4.8	13,54	-0,450	-0,85	-0,77	
259	LwK 4.8	13,55	-0,440	-0,83	-0,75	
260	LwK 4.8	13,90	-0,090	-0,17	-0,15	
261	LwK 4.8	14,20	0,210	0,39	0,36	
262	LwK 4.8	14,30	0,310	0,58	0,53	
263	LwK 4.8	14,20	0,210	0,39	0,36	
264	LwK 4.8	14,50	0,510	0,96	0,87	
265	LwK 4.8	10,14	-3,850	-7,24	-6,59	(**)
266	LwK 4.8	13,66	-0,330	-0,62	-0,57	
267	LwK 4.8	14,57	0,580	1,09	0,99	
268	LwK 4.8	13,55	-0,440	-0,83	-0,75	
269	LwK 4.8	14,53	0,540	1,01	0,92	
270	LwK 4.8	13,80	-0,190	-0,36	-0,33	
271	LwK 4.8	13,26	-0,730	-1,37	-1,25	
272	LwK 4.8	14,10	0,110	0,21	0,19	
273	LwK 4.8	13,25	-0,740	-1,39	-1,27	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der enzymatischen und HPLC-Ergebnisse ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
274	LwK 4.8	13,95	-0,040	-0,08	-0,07	
275	LwK 4.8	14,20	0,210	0,39	0,36	
276	LwK 4.8	13,60	-0,390	-0,73	-0,67	
277	LwK 4.8	13,09	-0,900	-1,69	-1,54	
278	LwK 4.8	12,35	-1,640	-3,08	-2,81	
279	LwK 4.8	12,86	-1,130	-2,12	-1,93	
280	LwK 4.8	13,10	-0,890	-1,67	-1,52	
281	LwK 4.8	13,17	-0,820	-1,54	-1,40	
282	LwK 4.8	13,56	-0,430	-0,81	-0,74	
283	LwK 4.8	13,20	-0,790	-1,48	-1,35	
319	LwK 4.8	12,80	-1,190	-2,24	-2,04	
320	LwK 4.8	13,68	-0,310	-0,58	-0,53	
336	LwK 4.8	13,21	-0,780	-1,47	-1,34	
337	LwK 4.8	13,70	-0,290	-0,55	-0,50	
349	LwK 4.8	13,10	-0,890	-1,67	-1,52	
364	LwK 4.8	14,60	0,610	1,15	1,04	
368	LwK 4.8	13,30	-0,690	-1,30	-1,18	

**5.4.3 Reduktometrische Laborergebnisse**

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
11	LwK 4.1	13,90	0,000	0,00	0,00	
19	LwK 4.4	13,40	-0,500	-0,94	-1,20	
23	LwK 4.4	14,50	0,600	1,13	1,43	
24	LwK 4.4	14,00	0,100	0,19	0,24	
27	LwK 4.4	14,60	0,700	1,32	1,67	
28	LwK 4.4	13,80	-0,100	-0,19	-0,24	
32	LwK 4.4	13,70	-0,200	-0,38	-0,48	
37	LwK 4.3	13,29	-0,610	-1,15	-1,46	
49	LwK 4.4	12,70	-1,200	-2,27	-2,87	
60	LwK 4.4	15,83	1,930	3,65	4,62	
62	LwK 4.4	13,90	0,000	0,00	0,00	
64	LwK 4.4	14,25	0,350	0,66	0,84	
77	LwK 4.4	13,54	-0,360	-0,68	-0,86	
101	LwK 4.4	14,30	0,400	0,76	0,96	

**5.4.4 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(r)**

(Bewertungsbasis: reduktometrische Verfahren; informative Bewertung)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
202	LwK 4.8	15,50	1,600	3,02	2,74	
203	LwK 4.8	14,07	0,170	0,32	0,29	
204	LwK 4.8	13,43	-0,470	-0,89	-0,80	
206	LwK 4.8	13,58	-0,320	-0,60	-0,55	
207	LwK 4.8	14,10	0,200	0,38	0,34	
208	LwK 4.8	14,20	0,300	0,57	0,51	
209	LwK 4.8	14,07	0,170	0,32	0,29	
210	LwK 4.8	13,45	-0,450	-0,85	-0,77	
211	LwK 4.8	13,37	-0,530	-1,00	-0,91	
212	LwK 4.8	13,67	-0,230	-0,43	-0,39	
214	LwK 4.8	13,30	-0,600	-1,13	-1,03	
215	LwK 4.8	13,34	-0,560	-1,06	-0,96	
216	LwK 4.8	12,25	-1,650	-3,12	-2,83	
217	LwK 4.8	12,83	-1,070	-2,02	-1,83	
218	LwK 4.8	13,30	-0,600	-1,13	-1,03	
220	LwK 4.8	15,04	1,140	2,15	1,95	
221	LwK 4.8	14,87	0,970	1,83	1,66	
222	LwK 4.8	14,39	0,490	0,93	0,84	
223	LwK 4.8	14,50	0,600	1,13	1,03	



**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(r)**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
224	LwK 4.8	13,86	-0,040	-0,08	-0,07	
225	LwK 4.8	13,78	-0,120	-0,23	-0,21	
226	LwK 4.8	12,90	-1,000	-1,89	-1,71	
227	LwK 4.8	14,47	0,570	1,08	0,98	
228	LwK 4.8	14,28	0,380	0,72	0,65	
229	LwK 4.8	13,01	-0,890	-1,68	-1,52	
232	LwK 4.8	13,32	-0,580	-1,10	-0,99	
234	LwK 4.8	13,66	-0,240	-0,45	-0,41	
235	LwK 4.8	14,90	1,000	1,89	1,71	
236	LwK 4.8	13,07	-0,830	-1,57	-1,42	
237	LwK 4.8	13,80	-0,100	-0,19	-0,17	
240	LwK 4.8	15,01	1,110	2,10	1,90	
241	LwK 4.8	13,70	-0,200	-0,38	-0,34	
242	LwK 4.8	14,49	0,590	1,12	1,01	
243	LwK 4.8	14,90	1,000	1,89	1,71	
244	LwK 4.8	13,43	-0,470	-0,89	-0,80	
245	LwK 4.8	13,66	-0,240	-0,45	-0,41	
246	LwK 4.8	14,10	0,200	0,38	0,34	
247	LwK 4.8	13,02	-0,880	-1,66	-1,51	
248	LwK 4.8	12,91	-0,990	-1,87	-1,70	
249	LwK 4.8	14,80	0,900	1,70	1,54	
250	LwK 4.8	12,81	-1,090	-2,06	-1,87	
251	LwK 4.8	13,22	-0,680	-1,29	-1,16	
252	LwK 4.8	14,10	0,200	0,38	0,34	
254	LwK 4.8	14,40	0,500	0,94	0,86	
255	LwK 4.8	12,20	-1,700	-3,21	-2,91	
256	LwK 4.8	15,30	1,400	2,65	2,40	
257	LwK 4.8	13,06	-0,840	-1,59	-1,44	
258	LwK 4.8	13,54	-0,360	-0,68	-0,62	
259	LwK 4.8	13,55	-0,350	-0,66	-0,60	
260	LwK 4.8	13,90	0,000	0,00	0,00	
261	LwK 4.8	14,20	0,300	0,57	0,51	
262	LwK 4.8	14,30	0,400	0,76	0,68	
263	LwK 4.8	14,20	0,300	0,57	0,51	
264	LwK 4.8	14,50	0,600	1,13	1,03	
265	LwK 4.8	10,14	-3,760	-7,11	-6,44	(**)
266	LwK 4.8	13,66	-0,240	-0,45	-0,41	
267	LwK 4.8	14,57	0,670	1,27	1,15	
268	LwK 4.8	13,55	-0,350	-0,66	-0,60	
269	LwK 4.8	14,53	0,630	1,19	1,08	
270	LwK 4.8	13,80	-0,100	-0,19	-0,17	
271	LwK 4.8	13,26	-0,640	-1,21	-1,10	
272	LwK 4.8	14,10	0,200	0,38	0,34	
273	LwK 4.8	13,25	-0,650	-1,23	-1,11	
274	LwK 4.8	13,95	0,050	0,09	0,09	
275	LwK 4.8	14,20	0,300	0,57	0,51	
276	LwK 4.8	13,60	-0,300	-0,57	-0,51	
277	LwK 4.8	13,09	-0,810	-1,53	-1,39	
278	LwK 4.8	12,35	-1,550	-2,93	-2,65	
279	LwK 4.8	12,86	-1,040	-1,97	-1,78	
280	LwK 4.8	13,10	-0,800	-1,51	-1,37	
281	LwK 4.8	13,17	-0,730	-1,38	-1,25	
282	LwK 4.8	13,56	-0,340	-0,64	-0,58	
283	LwK 4.8	13,20	-0,700	-1,32	-1,20	
319	LwK 4.8	12,80	-1,100	-2,08	-1,88	
320	LwK 4.8	13,68	-0,220	-0,42	-0,38	
336	LwK 4.8	13,21	-0,690	-1,30	-1,18	
337	LwK 4.8	13,70	-0,200	-0,38	-0,34	
349	LwK 4.8	13,10	-0,800	-1,51	-1,37	
364	LwK 4.8	14,60	0,700	1,32	1,20	
368	LwK 4.8	13,30	-0,600	-1,13	-1,03	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom maßgeblichen Median ab.

**5.4.5 FTIR-Laborergebnisse für Vergärbare Zucker(S)**

Bewertungsbasis: Enzymatik und Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; informative Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 4.8	13,99	-0,000	-0,00	-0,00	
202	LwK 4.8	13,70	-0,290	-0,55	-0,50	
203	LwK 4.8	14,25	0,260	0,49	0,45	
204	LwK 4.8	13,86	-0,129	-0,24	-0,22	
205	LwK 4.8	13,58	-0,410	-0,77	-0,70	
206	LwK 4.8	13,58	-0,410	-0,77	-0,70	
207	LwK 4.8	13,00	-0,990	-1,86	-1,70	
208	LwK 4.8	14,20	0,210	0,39	0,36	
209	LwK 4.8	14,07	0,080	0,15	0,14	
210	LwK 4.8	13,50	-0,490	-0,92	-0,84	
211	LwK 4.8	13,59	-0,400	-0,75	-0,68	
212	LwK 4.8	13,78	-0,210	-0,39	-0,36	
214	LwK 4.8	13,60	-0,390	-0,73	-0,67	
215	LwK 4.8	13,34	-0,650	-1,22	-1,11	
216	LwK 4.8	11,96	-2,030	-3,82	-3,48	
217	LwK 4.8	12,63	-1,360	-2,56	-2,33	
218	LwK 4.8	13,29	-0,700	-1,32	-1,20	
219	LwK 4.8	15,80	1,810	3,40	3,10	
220	LwK 4.8	13,01	-0,980	-1,84	-1,68	
221	LwK 4.8	13,62	-0,370	-0,70	-0,63	
222	LwK 4.8	14,70	0,710	1,33	1,22	
223	LwK 4.8	14,50	0,510	0,96	0,87	
224	LwK 4.8	13,63	-0,360	-0,68	-0,62	
225	LwK 4.8	13,69	-0,300	-0,56	-0,51	
226	LwK 4.8	13,90	-0,090	-0,17	-0,15	
227	LwK 4.8	13,14	-0,850	-1,60	-1,46	
228	LwK 4.8	13,71	-0,280	-0,53	-0,48	
229	LwK 4.8	14,23	0,240	0,45	0,41	
231	LwK 4.8	14,20	0,210	0,39	0,36	
232	LwK 4.8	13,32	-0,670	-1,26	-1,15	
234	LwK 4.8	14,10	0,110	0,21	0,19	
235	LwK 4.8	14,80	0,810	1,52	1,39	
236	LwK 4.8	13,04	-0,950	-1,79	-1,63	
237	LwK 4.8	14,80	0,810	1,52	1,39	
240	LwK 4.8	13,47	-0,520	-0,98	-0,89	
241	LwK 4.8	14,40	0,410	0,77	0,70	
242	LwK 4.8	14,00	0,010	0,02	0,02	
243	LwK 4.8	14,99	1,000	1,88	1,71	
244	LwK 4.8	14,53	0,540	1,01	0,92	
245	LwK 4.8	14,03	0,040	0,08	0,07	
246	LwK 4.8	13,30	-0,690	-1,30	-1,18	
247	LwK 4.8	14,30	0,310	0,58	0,53	
249	LwK 4.8	14,70	0,710	1,33	1,22	
250	LwK 4.8	13,48	-0,510	-0,96	-0,87	
251	LwK 4.8	13,21	-0,780	-1,47	-1,34	
252	LwK 4.8	14,50	0,510	0,96	0,87	
254	LwK 4.8	13,20	-0,790	-1,48	-1,35	
256	LwK 4.8	14,80	0,810	1,52	1,39	
257	LwK 4.8	13,42	-0,570	-1,07	-0,98	
258	LwK 4.8	11,82	-2,170	-4,08	-3,72	
259	LwK 4.8	13,78	-0,210	-0,39	-0,36	
260	LwK 4.8	13,50	-0,490	-0,92	-0,84	
261	LwK 4.8	14,20	0,210	0,39	0,36	
262	LwK 4.8	13,40	-0,590	-1,11	-1,01	
263	LwK 4.8	14,20	0,210	0,39	0,36	
264	LwK 4.8	14,40	0,410	0,77	0,70	
265	LwK 4.8	12,98	-1,010	-1,90	-1,73	
266	LwK 4.8	13,63	-0,360	-0,68	-0,62	
267	LwK 4.8	13,52	-0,470	-0,88	-0,80	
268	LwK 4.8	13,50	-0,490	-0,92	-0,84	
270	LwK 4.8	12,90	-1,090	-2,05	-1,87	
271	LwK 4.8	12,66	-1,330	-2,50	-2,28	
272	LwK 4.8	14,10	0,110	0,21	0,19	
273	LwK 4.8	14,37	0,380	0,71	0,65	

**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse für Vergärbare Zucker(S)**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
275	LwK 4.8	14,10	0,110	0,21	0,19	
276	LwK 4.8	12,90	-1,090	-2,05	-1,87	
277	LwK 4.8	13,09	-0,900	-1,69	-1,54	
278	LwK 4.8	14,65	0,660	1,24	1,13	
279	LwK 4.8	14,93	0,940	1,77	1,61	
280	LwK 4.8	13,30	-0,690	-1,30	-1,18	
281	LwK 4.8	13,17	-0,820	-1,54	-1,40	
282	LwK 4.8	12,98	-1,010	-1,90	-1,73	
283	LwK 4.8	13,20	-0,790	-1,48	-1,35	
312	LwK 4.8	12,08	-1,910	-3,59	-3,27	
319	LwK 4.8	14,20	0,210	0,39	0,36	
320	LwK 4.8	12,74	-1,250	-2,35	-2,14	
323	LwK 4.8	13,70	-0,290	-0,55	-0,50	
336	LwK 4.8	15,10	1,110	2,09	1,90	
337	LwK 4.8	14,80	0,810	1,52	1,39	
343	LwK 4.8	14,50	0,510	0,96	0,87	
349	LwK 4.8	14,80	0,810	1,52	1,39	
364	LwK 4.8	14,00	0,010	0,02	0,02	

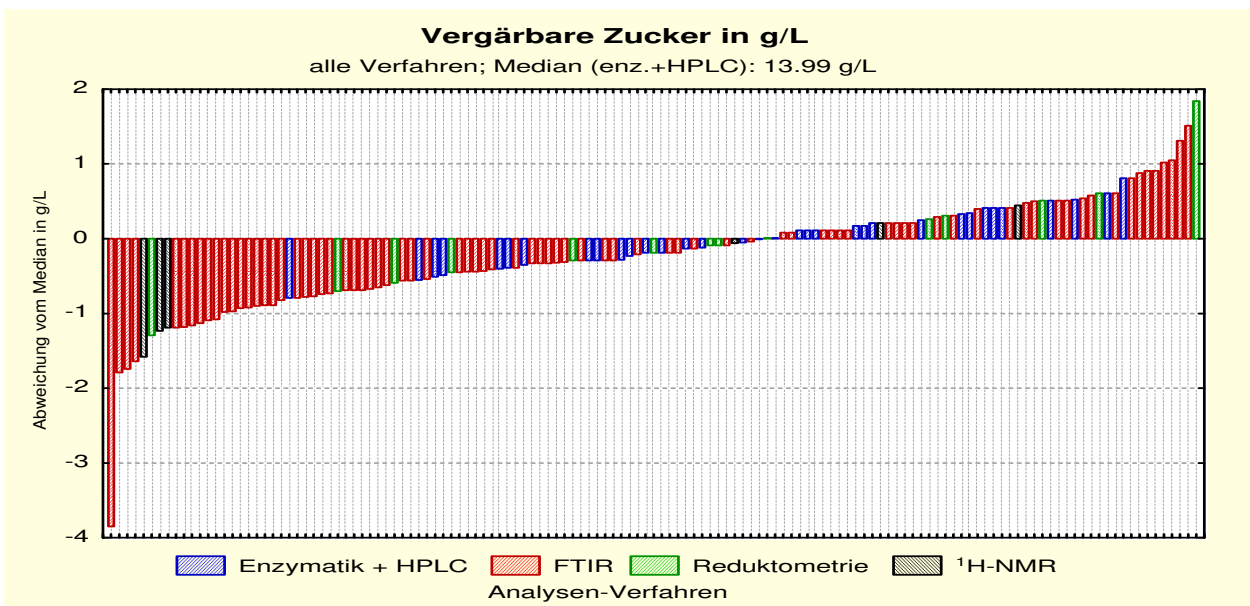
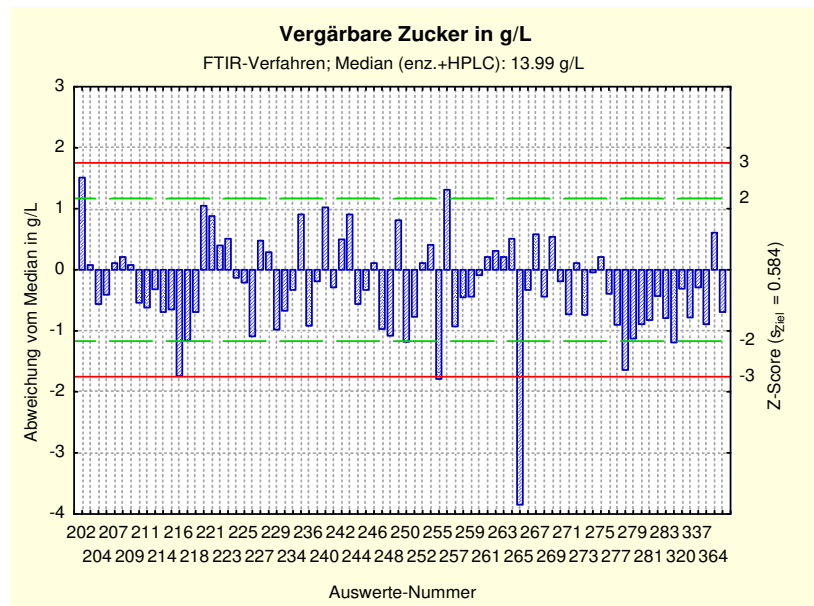
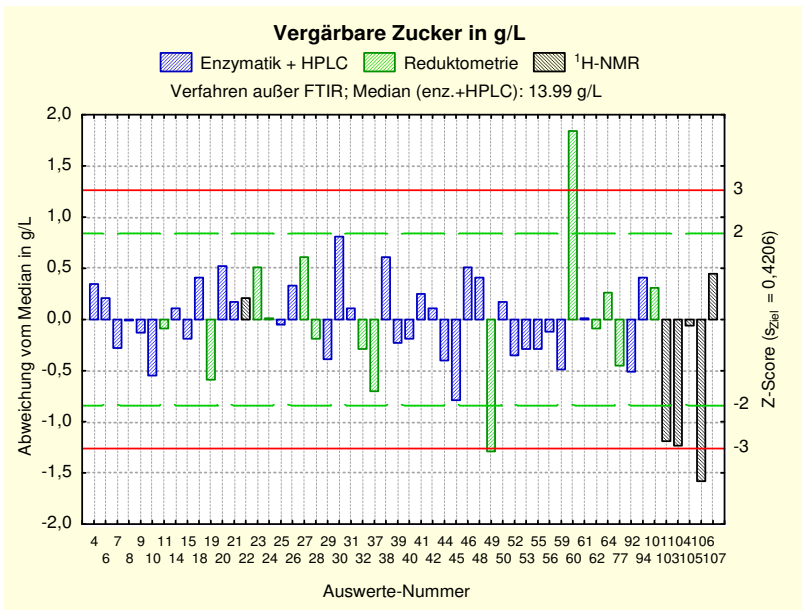
**5.4.6 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

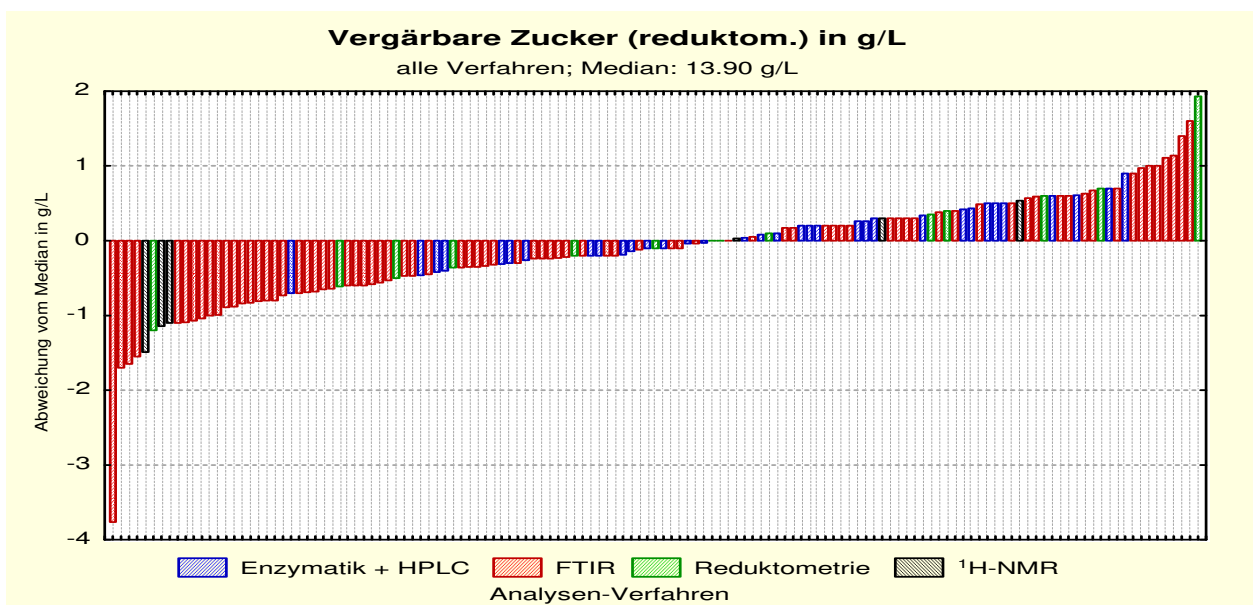
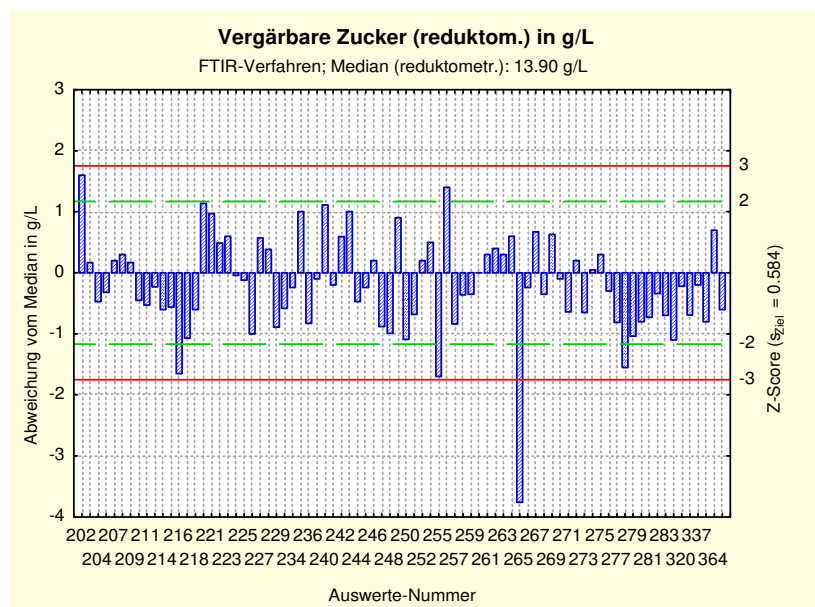
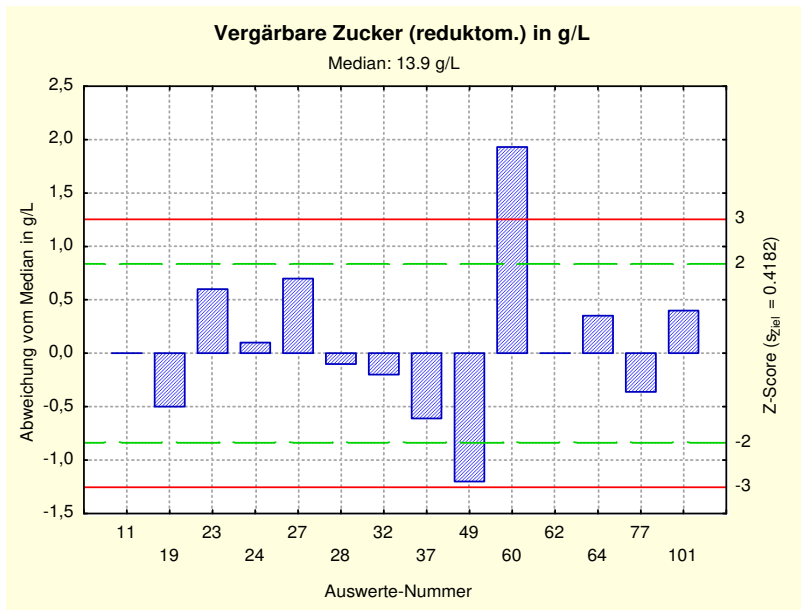
Ergebnisse für Vergärbare Zucker [g/L]	HPLC + enzymatisch alle Daten	reduktometrisch alle Daten
Gültige Werte	34	14
Minimalwert	13,20	12,70
Mittelwert	13,997	13,979
Median	13,990	13,900
Maximalwert	14,80	15,83
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,380	0,735
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,065	0,196
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,532	0,529
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,421	0,418
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\text{FTIR}}$ ) <sup>1)</sup>	0,584	0,584
Hörrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,71	1,39
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,90	1,76
Quotient ( $s_L/s_{\text{FTIR}}$ )	0,65	1,26
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,12	0,37
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,15	0,47
Quotient ( $u_M/s_{\text{FTIR}}$ )	0,11	0,34

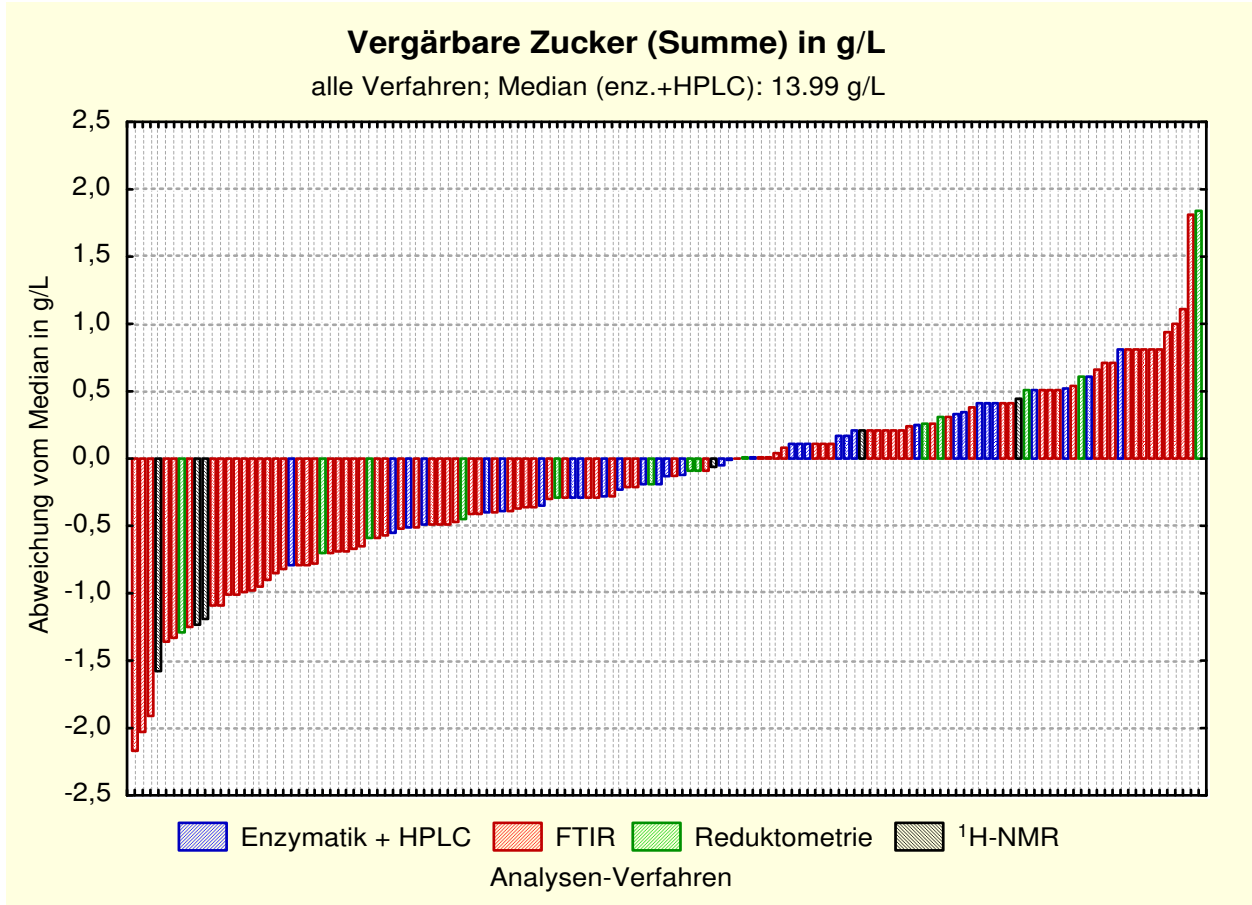
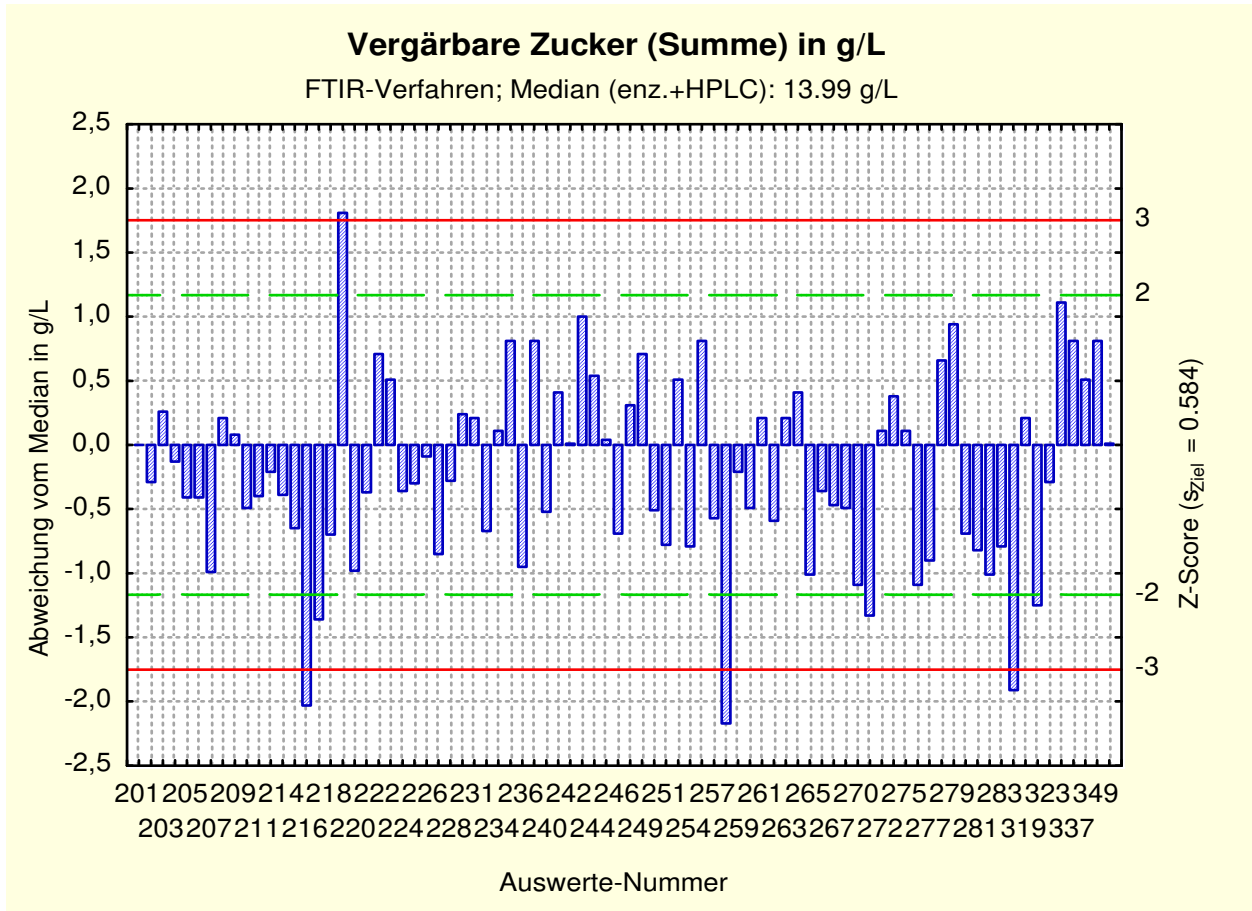
<sup>1)</sup> Die FTIR-Laboreergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung  $s_{exp\ herk.}$  bewertet.

**5.4.7 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 4.1	Bestimmung n. Luff-Schoorl; OIV-MA-AS311-01A	1	13,900	
LwK 4.3	Schnellmethode n. Dr. Jakob	1	13,290	
LwK 4.4	Schnellmethode n. Dr. Rebelein	12	13,999	0,603
	reduktometrische Verfahren	14	13,932	0,587
LwK 4.5	Enzymatische Methode; OIV-MA-AS311-02	23	13,903	0,382
LwK 4.7	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	11	14,201	0,365
	enzymatische und HPLC-Verfahren	34	13,997	0,405
LwK 4.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie			
	Basis: Vergärbare Zucker (r)	81	13,720	0,722
	Basis: Vergärbare Zucker (S)	83	13,788	0,729
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	13,422	0,981







## 5.5 Glucose [g/L]

### 5.5.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
04	enzymat., autom.	7,03	0,211	0,73	0,93	
06	enzymat., autom.	6,98	0,166	0,57	0,73	
08	enzymat. Hand	6,90	0,086	0,30	0,38	
09	enzymat. Hand	6,84	0,026	0,09	0,11	
10	enzymat., autom.	6,57	-0,244	-0,84	-1,08	
11	enzymat., autom.	6,91	0,096	0,33	0,42	
14	enzymat., autom.	6,83	0,016	0,06	0,07	
15	enzymat., autom.	6,91	0,093	0,32	0,41	
18	HPLC	6,87	0,056	0,19	0,25	
20	HPLC	6,89	0,076	0,26	0,33	
21	HPLC	6,80	-0,014	-0,05	-0,06	
22	NMR	6,86	0,046	0,16	0,20	
25	enzymat., autom.	6,82	0,006	0,02	0,03	
26	HPLC	7,01	0,196	0,68	0,86	
28	FTIR	7,21	0,396	1,37	1,75	
29	enzymat., autom.	6,60	-0,214	-0,74	-0,94	
30	HPLC	7,03	0,216	0,75	0,95	
31	enzymat., autom.	6,81	0,000	0,00	0,00	
38	enzymat., autom.	6,84	0,026	0,09	0,11	
39	HPLC	6,70	-0,114	-0,39	-0,50	
40	enzymat., autom.	6,80	-0,014	-0,05	-0,06	
41	enzymat., autom.	7,17	0,356	1,23	1,57	
42	HPLC	6,76	-0,056	-0,19	-0,25	
44	enzymat., autom.	6,61	-0,204	-0,71	-0,90	
45	enzymat., autom.	6,47	-0,344	-1,19	-1,52	
48	enzymat., autom.	6,90	0,086	0,30	0,38	
50	HPLC	6,78	-0,034	-0,12	-0,15	
52	enzymat., autom.	6,75	-0,064	-0,22	-0,28	
53	enzymat., autom.	6,61	-0,204	-0,71	-0,90	
56	enzymat., autom.	6,73	-0,084	-0,29	-0,37	
59	HPLC	6,58	-0,234	-0,81	-1,03	
61	HPLC	6,80	-0,014	-0,05	-0,06	
64	enzymat. Hand	7,03	0,216	0,75	0,95	
69	enzymat., autom.	6,80	-0,016	-0,06	-0,07	
86	enzymat. Hand	6,57	-0,244	-0,84	-1,08	
88	enzymat., autom.	7,05	0,236	0,82	1,04	
92	enzymat., autom.	6,65	-0,164	-0,57	-0,72	
94	HPLC	6,78	-0,034	-0,12	-0,15	
101	enzymat. Hand	7,03	0,216	0,75	0,95	
103	NMR	6,40	-0,414	-1,43	-1,82	
104	NMR	6,33	-0,488	-1,69	-2,15	
105	NMR	7,06	0,246	0,85	1,08	
106	NMR	6,27	-0,541	-1,87	-2,38	
107	NMR	7,21	0,400	1,38	1,76	

### 5.5.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	6,81	-0,004	-0,01	-0,01	
202	FTIR	6,21	-0,604	-2,09	-1,48	
203	FTIR	6,82	0,006	0,02	0,01	
204	FTIR	6,62	-0,190	-0,66	-0,47	
205	FTIR	6,75	-0,064	-0,22	-0,16	
206	FTIR	6,55	-0,264	-0,91	-0,65	
207	FTIR	7,00	0,186	0,64	0,46	
208	FTIR	7,00	0,186	0,64	0,46	
209	FTIR	6,63	-0,184	-0,64	-0,45	
210	FTIR	6,85	0,036	0,12	0,09	
211	FTIR	6,37	-0,444	-1,54	-1,09	
212	FTIR	6,45	-0,364	-1,26	-0,89	
214	FTIR	7,00	0,186	0,64	0,46	
215	FTIR	6,72	-0,094	-0,33	-0,23	
216	FTIR	6,06	-0,754	-2,61	-1,85	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
217	FTIR	5,97	-0,844	-2,92	-2,07	
218	FTIR	6,22	-0,594	-2,06	-1,46	
219	FTIR	8,50	1,686	5,84	4,13	
220	FTIR	6,16	-0,654	-2,26	-1,60	
221	FTIR	6,68	-0,134	-0,46	-0,33	
222	FTIR	7,50	0,686	2,38	1,68	
223	FTIR	6,80	-0,014	-0,05	-0,03	
224	FTIR	6,34	-0,474	-1,64	-1,16	
225	FTIR	6,38	-0,434	-1,50	-1,06	
226	FTIR	6,90	0,086	0,30	0,21	
227	FTIR	6,45	-0,364	-1,26	-0,89	
228	FTIR	7,21	0,396	1,37	0,97	
229	FTIR	6,75	-0,064	-0,22	-0,16	
231	FTIR	6,50	-0,314	-1,09	-0,77	
232	FTIR	6,58	-0,234	-0,81	-0,57	
234	FTIR	7,00	0,186	0,64	0,46	
235	FTIR	6,80	-0,014	-0,05	-0,03	
236	FTIR	6,57	-0,244	-0,84	-0,60	
237	FTIR	8,40	1,586	5,49	3,89	
240	FTIR	6,30	-0,514	-1,78	-1,26	
241	FTIR	6,90	0,086	0,30	0,21	
242	FTIR	6,59	-0,224	-0,78	-0,55	
243	FTIR	7,49	0,676	2,34	1,66	
244	FTIR	6,71	-0,104	-0,36	-0,25	
245	FTIR	6,37	-0,444	-1,54	-1,09	
246	FTIR	6,30	-0,514	-1,78	-1,26	
247	FTIR	6,28	-0,534	-1,85	-1,31	
249	FTIR	6,90	0,086	0,30	0,21	
250	FTIR	6,04	-0,774	-2,68	-1,90	
251	FTIR	6,19	-0,624	-2,16	-1,53	
252	FTIR	7,01	0,196	0,68	0,48	
254	FTIR	6,60	-0,214	-0,74	-0,52	
256	FTIR	5,90	-0,914	-3,17	-2,24	
257	FTIR	6,54	-0,274	-0,95	-0,67	
258	FTIR	5,23	-1,584	-5,49	-3,88	
259	FTIR	6,84	0,026	0,09	0,06	
260	FTIR	6,80	-0,014	-0,05	-0,03	
261	FTIR	7,00	0,186	0,64	0,46	
262	FTIR	7,20	0,386	1,34	0,95	
263	FTIR	6,90	0,086	0,30	0,21	
264	FTIR	6,50	-0,314	-1,09	-0,77	
265	FTIR	6,29	-0,524	-1,81	-1,28	
266	FTIR	6,48	-0,334	-1,16	-0,82	
267	FTIR	6,68	-0,134	-0,46	-0,33	
268	FTIR	6,15	-0,664	-2,30	-1,63	
270	FTIR	7,00	0,186	0,64	0,46	
271	FTIR	6,31	-0,504	-1,75	-1,24	
272	FTIR	6,00	-0,814	-2,82	-2,00	
273	FTIR	6,72	-0,094	-0,33	-0,23	
275	FTIR	6,00	-0,814	-2,82	-2,00	
276	FTIR	6,50	-0,314	-1,09	-0,77	
277	FTIR	6,44	-0,374	-1,30	-0,92	
278	FTIR	7,59	0,776	2,69	1,90	
279	FTIR	7,64	0,826	2,86	2,02	
280	FTIR	6,60	-0,214	-0,74	-0,52	
281	FTIR	6,28	-0,534	-1,85	-1,31	
282	FTIR	6,15	-0,664	-2,30	-1,63	
283	FTIR	5,90	-0,914	-3,17	-2,24	
312	FTIR	5,52	-1,294	-4,48	-3,17	
319	FTIR	6,70	-0,114	-0,39	-0,28	
320	FTIR	6,17	-0,644	-2,23	-1,58	
323	FTIR	7,20	0,386	1,34	0,95	
336	FTIR	7,20	0,386	1,34	0,95	
337	FTIR	6,50	-0,314	-1,09	-0,77	
343	FTIR	7,66	0,846	2,93	2,07	
349	FTIR	7,00	0,186	0,64	0,46	
364	FTIR	6,00	-0,814	-2,82	-2,00	

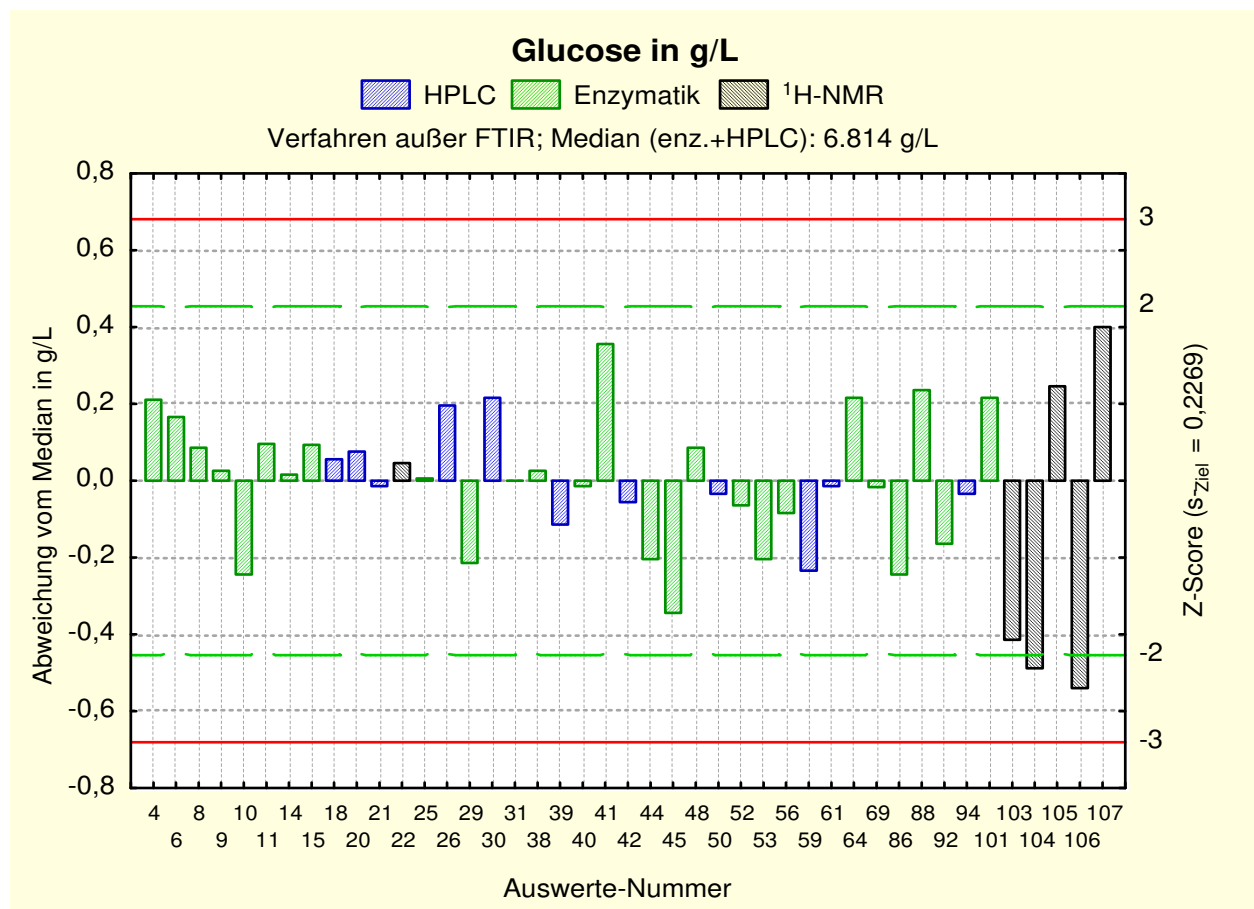


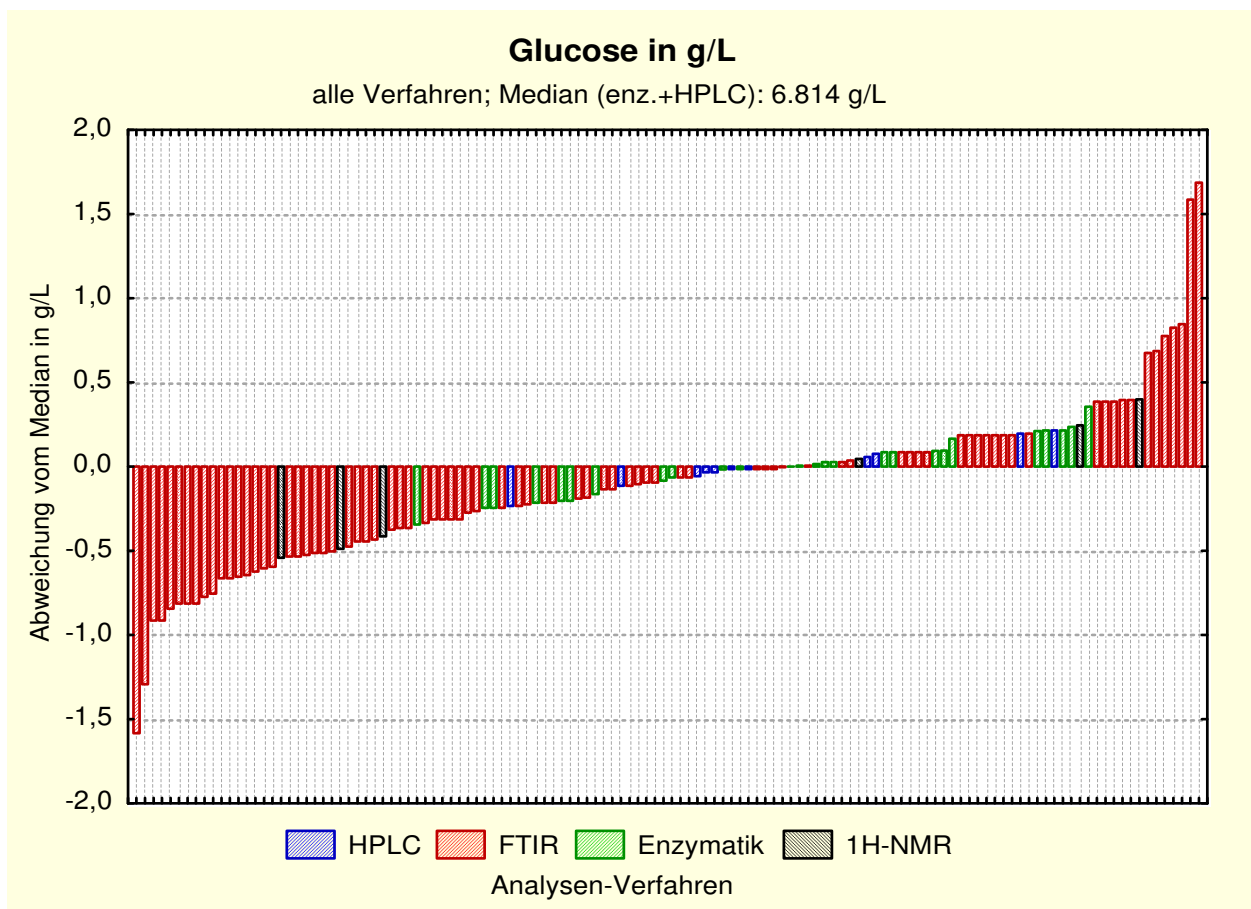
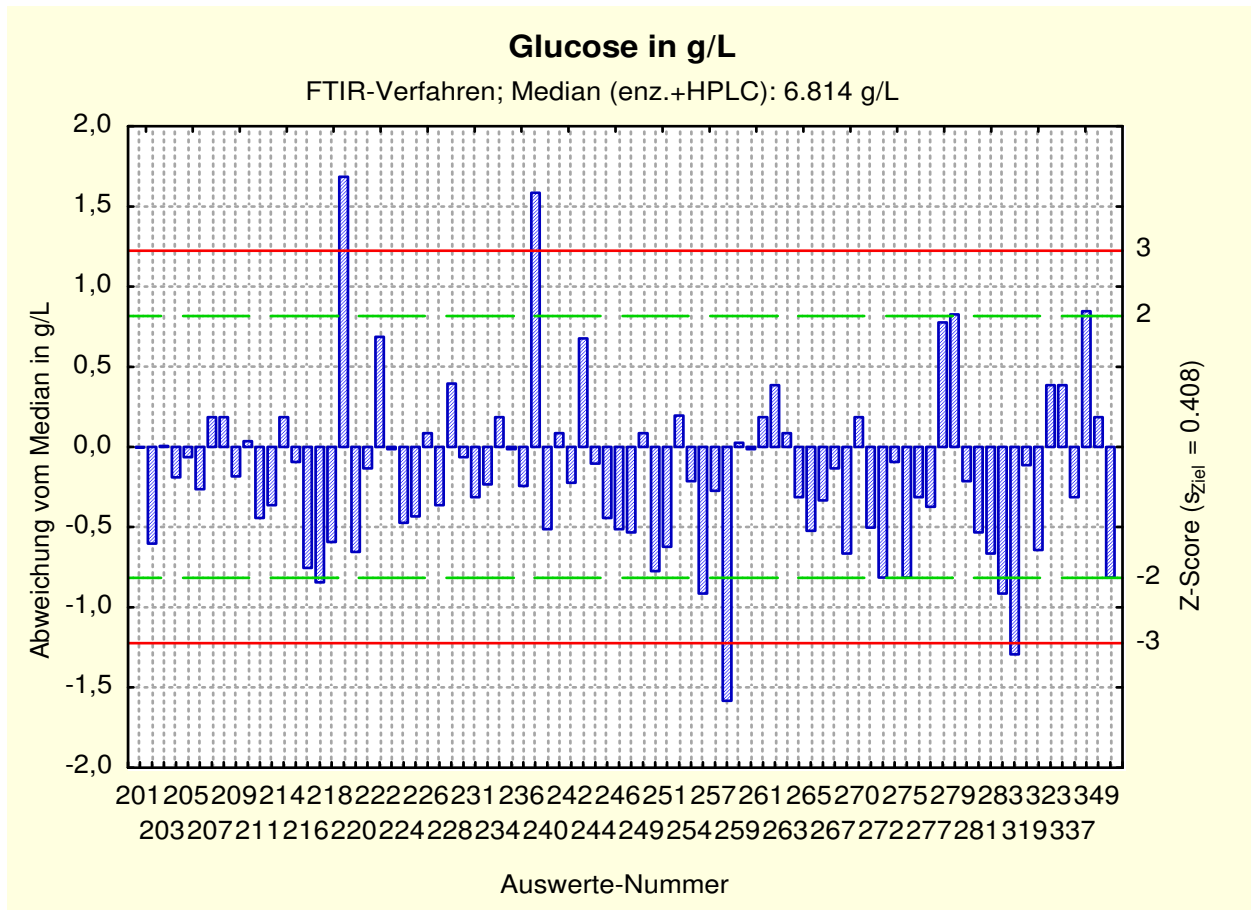
### 5.5.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glucose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	37
Minimalwert	6,47
Mittelwert	6,816
Median	6,814
Maximalwert	7,17
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,163
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,027
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,289
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,227
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,408
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,56
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	0,72
Quotient ( $s_L/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,40
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,09
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,12
Quotient ( $u_M/s_{\dot{U}\ FTIR}$ )	0,07

### 5.5.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	11	6,821	0,140
enzymat. autom.	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02, automatisiert	21	6,800	0,179
enzymat. Hand	enzymatisch; OIV-MA-AS311-02, manuell	5	6,878	0,206
	herkömmliche Verfahren	37	6,816	0,168
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	83	6,622	0,459
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	6,689	0,462





## 5.6 Fructose [g/L]

### 5.6.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
04	enzymat., autom.	7,31	0,181	0,60	0,77	
06	enzymat., autom.	7,24	0,111	0,37	0,47	
08	enzymat. Hand	7,08	-0,049	-0,16	-0,21	
09	enzymat. Hand	7,02	-0,109	-0,36	-0,46	
10	enzymat., autom.	6,86	-0,269	-0,90	-1,14	
11	enzymat., autom.	7,24	0,111	0,37	0,47	
14	enzymat., autom.	7,30	0,171	0,57	0,73	
15	enzymat., autom.	6,91	-0,215	-0,72	-0,91	
18	HPLC	7,50	0,371	1,24	1,58	
20	HPLC	7,62	0,491	1,64	2,09	
21	HPLC	7,36	0,231	0,77	0,98	
22	NMR	7,38	0,251	0,84	1,07	
25	enzymat., autom.	7,12	-0,009	-0,03	-0,04	
26	HPLC	7,31	0,181	0,60	0,77	
29	enzymat., autom.	7,05	-0,079	-0,26	-0,34	
30	HPLC	7,73	0,601	2,00	2,55	
31	enzymat., autom.	7,25	0,120	0,40	0,51	
38	enzymat., autom.	7,75	0,621	2,07	2,64	
39	HPLC	7,06	-0,069	-0,23	-0,29	
40	enzymat., autom.	7,00	-0,129	-0,43	-0,55	
41	enzymat., autom.	7,07	-0,059	-0,20	-0,25	
42	HPLC	7,39	0,260	0,87	1,10	
44	enzymat., autom.	6,98	-0,149	-0,50	-0,63	
45	enzymat., autom.	6,70	-0,429	-1,43	-1,82	
48	enzymat., autom.	7,10	-0,029	-0,10	-0,12	
50	HPLC	7,38	0,251	0,84	1,07	
52	enzymat., autom.	6,83	-0,299	-1,00	-1,27	
53	enzymat., autom.	6,98	-0,149	-0,50	-0,63	
56	enzymat., autom.	7,14	0,011	0,04	0,05	
59	HPLC	6,91	-0,219	-0,73	-0,93	
61	HPLC	7,20	0,071	0,24	0,30	
64	enzymat. Hand	7,16	0,031	0,10	0,13	
69	enzymat., autom.	6,90	-0,226	-0,75	-0,96	
86	enzymat. Hand	6,76	-0,369	-1,23	-1,57	
88	enzymat., autom.	7,30	0,171	0,57	0,73	
92	enzymat., autom.	6,83	-0,299	-1,00	-1,27	
94	HPLC	7,54	0,411	1,37	1,75	
101	enzymat. Hand	7,13	0,000	0,00	0,00	
103	NMR	6,40	-0,729	-2,43	-3,10	
104	NMR	6,43	-0,698	-2,33	-2,96	
105	NMR	6,87	-0,259	-0,86	-1,10	
106	NMR	6,14	-0,991	-3,30	-4,21	
107	NMR	7,22	0,092	0,30	0,39	

### 5.6.2 FTIR-Laboregebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	7,18	0,051	0,17	0,15	
202	FTIR	7,49	0,361	1,20	1,09	
203	FTIR	7,43	0,301	1,00	0,91	
204	FTIR	7,24	0,108	0,36	0,33	
205	FTIR	6,83	-0,299	-1,00	-0,91	
206	FTIR	7,03	-0,099	-0,33	-0,30	
207	FTIR	6,00	-1,129	-3,76	-3,42	
208	FTIR	7,20	0,071	0,24	0,22	
209	FTIR	7,44	0,311	1,04	0,94	
210	FTIR	6,65	-0,479	-1,60	-1,45	
211	FTIR	7,22	0,091	0,30	0,28	
212	FTIR	7,33	0,201	0,67	0,61	
214	FTIR	6,60	-0,529	-1,76	-1,60	
215	FTIR	6,62	-0,509	-1,70	-1,54	
216	FTIR	5,90	-1,229	-4,10	-3,72	
217	FTIR	6,66	-0,469	-1,56	-1,42	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
218	FTIR	7,07	-0,059	-0,20	-0,18	
219	FTIR	7,30	0,171	0,57	0,52	
220	FTIR	6,85	-0,279	-0,93	-0,85	
221	FTIR	6,94	-0,189	-0,63	-0,57	
222	FTIR	7,20	0,071	0,24	0,22	
223	FTIR	7,70	0,571	1,90	1,73	
224	FTIR	7,29	0,161	0,54	0,49	
225	FTIR	7,31	0,181	0,60	0,55	
226	FTIR	7,00	-0,129	-0,43	-0,39	
227	FTIR	6,69	-0,439	-1,46	-1,33	
228	FTIR	6,50	-0,629	-2,10	-1,91	
229	FTIR	7,48	0,351	1,17	1,06	
231	FTIR	7,70	0,571	1,90	1,73	
232	FTIR	6,74	-0,389	-1,30	-1,18	
234	FTIR	7,10	-0,029	-0,10	-0,09	
235	FTIR	8,00	0,871	2,90	2,64	
236	FTIR	6,47	-0,659	-2,20	-2,00	
237	FTIR	6,40	-0,729	-2,43	-2,21	
240	FTIR	7,17	0,041	0,14	0,12	
241	FTIR	7,50	0,371	1,24	1,12	
242	FTIR	7,41	0,281	0,94	0,85	
243	FTIR	7,50	0,371	1,24	1,12	
244	FTIR	7,82	0,691	2,30	2,09	
245	FTIR	7,66	0,531	1,77	1,61	
246	FTIR	7,00	-0,129	-0,43	-0,39	
247	FTIR	8,02	0,891	2,97	2,70	
249	FTIR	7,80	0,671	2,24	2,03	
250	FTIR	7,44	0,311	1,04	0,94	
251	FTIR	7,02	-0,109	-0,36	-0,33	
252	FTIR	7,49	0,361	1,20	1,09	
254	FTIR	6,60	-0,529	-1,76	-1,60	
256	FTIR	8,90	1,771	5,90	5,37	(**)
257	FTIR	6,88	-0,249	-0,83	-0,75	
258	FTIR	6,59	-0,539	-1,80	-1,63	
259	FTIR	6,94	-0,189	-0,63	-0,57	
260	FTIR	6,70	-0,429	-1,43	-1,30	
261	FTIR	7,20	0,071	0,24	0,22	
262	FTIR	6,20	-0,929	-3,10	-2,82	
263	FTIR	7,30	0,171	0,57	0,52	
264	FTIR	7,90	0,771	2,57	2,34	
265	FTIR	6,69	-0,439	-1,46	-1,33	
266	FTIR	7,15	0,021	0,07	0,06	
267	FTIR	6,84	-0,289	-0,96	-0,88	
268	FTIR	7,35	0,221	0,74	0,67	
270	FTIR	5,90	-1,229	-4,10	-3,72	
271	FTIR	6,35	-0,779	-2,60	-2,36	
272	FTIR	8,10	0,971	3,24	2,94	
273	FTIR	7,65	0,521	1,74	1,58	
275	FTIR	8,10	0,971	3,24	2,94	
276	FTIR	6,40	-0,729	-2,43	-2,21	
277	FTIR	6,65	-0,479	-1,60	-1,45	
278	FTIR	7,06	-0,069	-0,23	-0,21	
279	FTIR	7,29	0,161	0,54	0,49	
280	FTIR	6,70	-0,429	-1,43	-1,30	
281	FTIR	6,89	-0,239	-0,80	-0,72	
282	FTIR	6,83	-0,299	-1,00	-0,91	
283	FTIR	7,30	0,171	0,57	0,52	
312	FTIR	6,56	-0,569	-1,90	-1,72	
319	FTIR	7,50	0,371	1,24	1,12	
320	FTIR	6,57	-0,559	-1,86	-1,69	
323	FTIR	6,50	-0,629	-2,10	-1,91	
336	FTIR	7,90	0,771	2,57	2,34	
337	FTIR	8,30	1,171	3,90	3,55	
343	FTIR	6,84	-0,289	-0,96	-0,88	
349	FTIR	7,80	0,671	2,24	2,03	
364	FTIR	8,00	0,871	2,90	2,64	

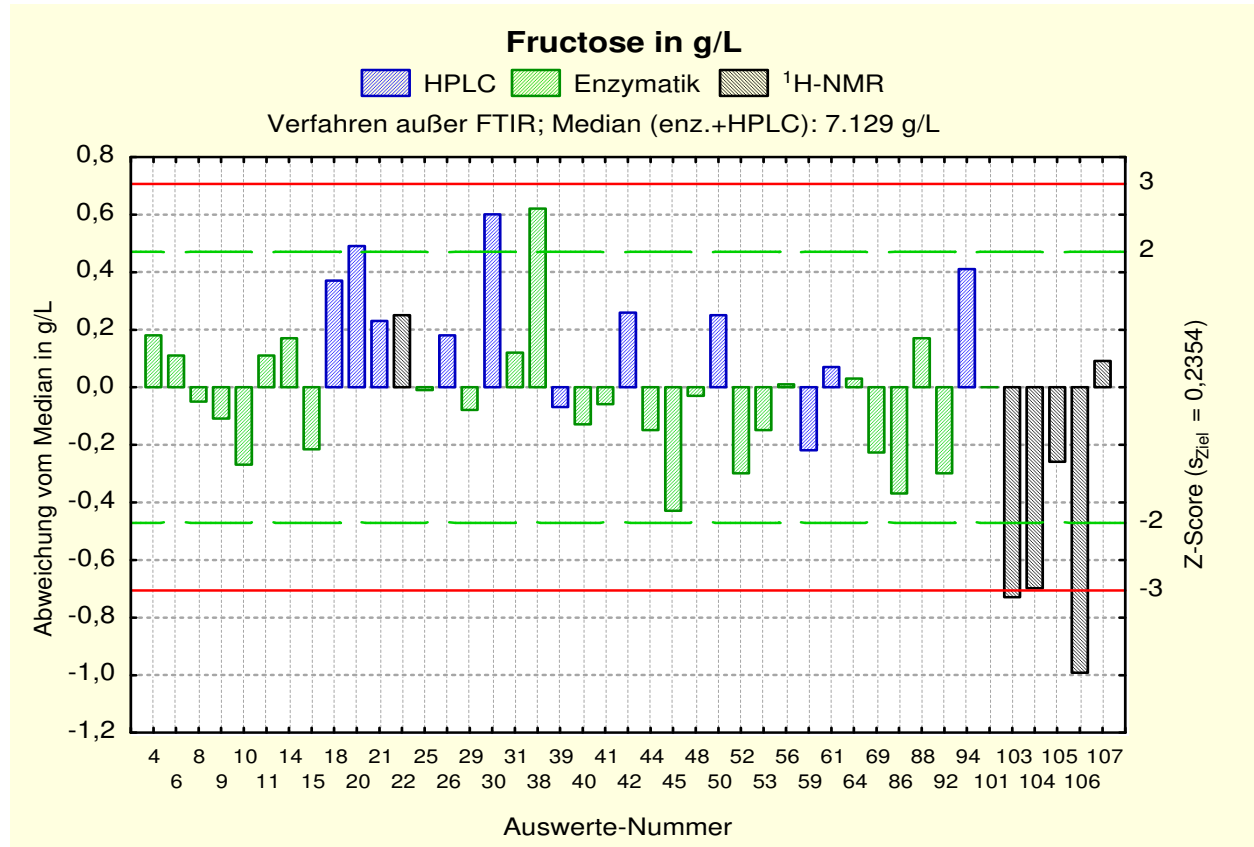
### 5.6.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

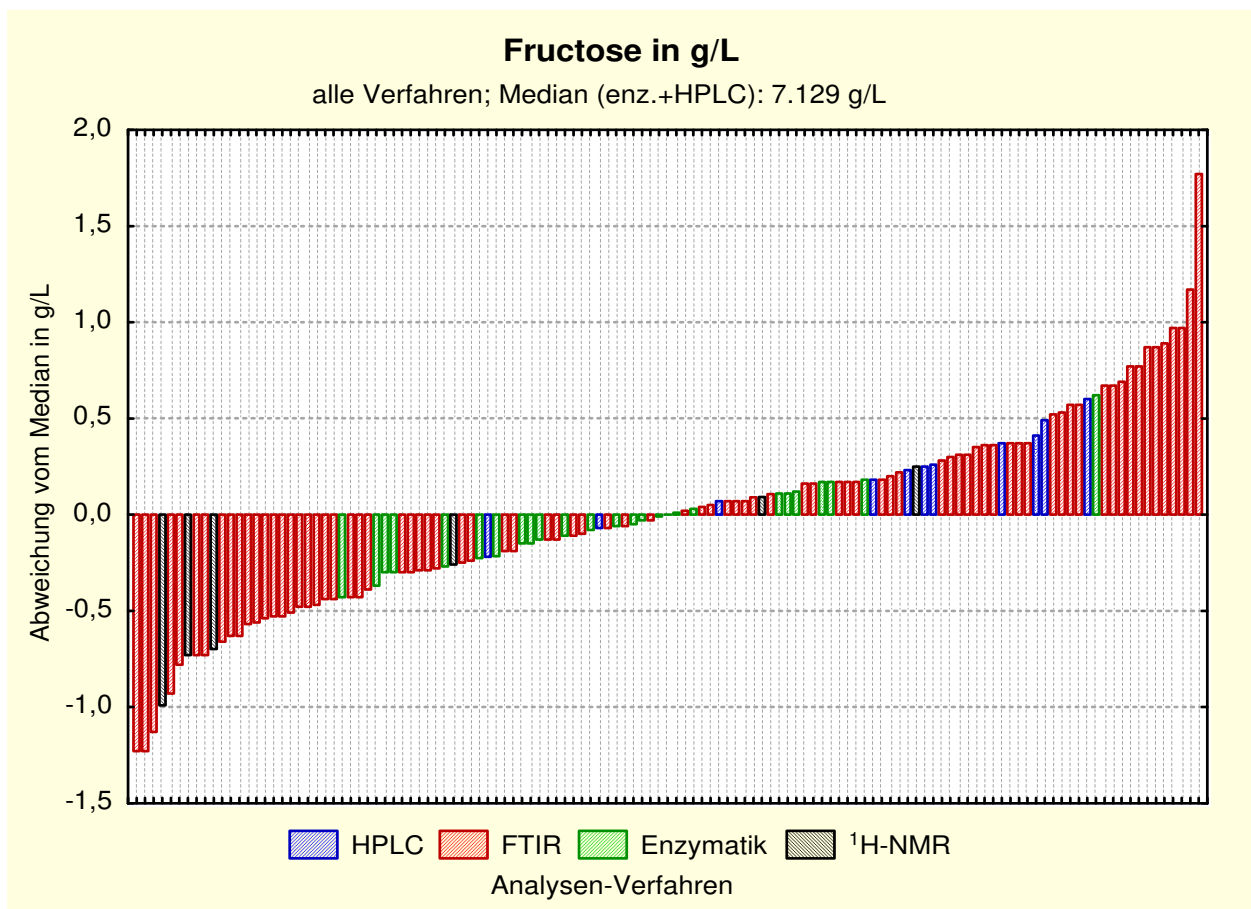
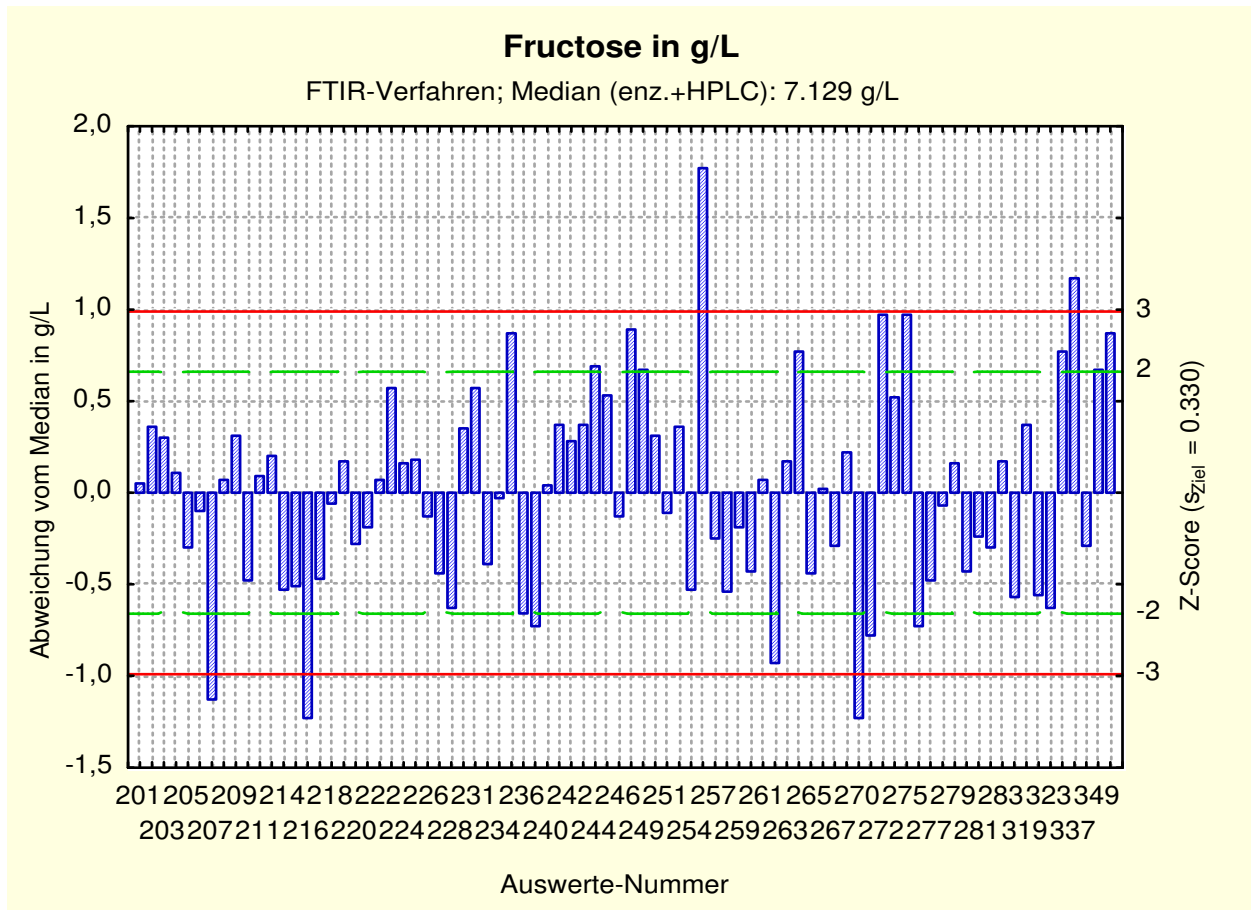
Ergebnisse für Fructose [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	37
Minimalwert	6,70
Mittelwert	7,163
Median	7,129
Maximalwert	7,75
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,259
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,043
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,300
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,235
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp FTIR</sub> ) <sup>1)</sup>	0,330
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,86
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,10
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp FTIR</sub> )	0,78
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,14
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,18
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>FTIR</sub> )	0,13

<sup>1)</sup> Die FTIR-Laboreergebnisse wurden mit der Zielstandardabweichung s<sub>exp herk.</sub> bewertet.

### 5.6.4 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie; OIV-MA-AS311-03	11	7,370	0,257
enzymat. autom.	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, automatisiert	21	7,075	0,212
enzymat. Hand	OIV-MA-AS311-02, enzymatisch, manuell	5	7,030	0,181
	herkömmliche Verfahren	37	7,151	0,262
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	82	7,126	0,561
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	6,740	0,563





## 5.7 Glycerin [g/L]

### 5.7.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
04	enzymat. autom.	4,94	0,02	0,07	
06	enzymat. autom.	5,01	0,08	0,39	
07	enzymat. autom.	4,92	-0,00	-0,02	
08	enzymat. Hand	4,96	0,04	0,16	
10	enzymat. autom.	5,69	0,77	3,49	
11	enzymat. Hand	4,93	0,00	0,02	
20	HPLC	4,87	-0,05	-0,25	
21	HPLC	4,79	-0,13	-0,62	
22	NMR	5,04	0,12	0,52	
26	HPLC	4,99	0,07	0,30	
30	HPLC	4,95	0,03	0,11	
39	HPLC	4,75	-0,17	-0,80	
42	HPLC	4,88	-0,04	-0,20	
44	enzymat. autom.	4,96	0,04	0,16	
48	HPLC	4,84	-0,08	-0,37	
50	HPLC	4,95	0,03	0,11	
56	enzymat. autom.	5,00	0,08	0,34	
59	enzymat. autom.	4,90	-0,02	-0,11	
61	HPLC	4,60	-0,33	-1,48	
86	enzymat. Hand	4,76	-0,17	-0,75	
88	enzymat. autom.	5,26	0,34	1,55	
89	enzymat. Hand	4,86	-0,06	-0,30	
94	HPLC	4,92	-0,00	-0,02	
103	NMR	5,30	0,38	1,71	
104	NMR	4,68	-0,25	-1,13	
105	NMR	4,75	-0,17	-0,80	
106	NMR	4,84	-0,09	-0,41	
107	NMR	5,02	0,09	0,42	

### 5.7.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Glycerin [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	22
Minimalwert	4,6
Mittelwert	4,94
Median	4,92
Maximalwert	5,7
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,208
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,044
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,219
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,348
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,95
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,60
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,20
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	0,13

### 5.7.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	10	4,865	0,105
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	8	5,034	0,171
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	4	4,883	0,089
	herkömmliche Verfahren	22	4,913	0,104
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	70	4,949	0,392
NMR	$^1\text{H}$ -Kernresonanzspektroskopie	6	4,935	0,256

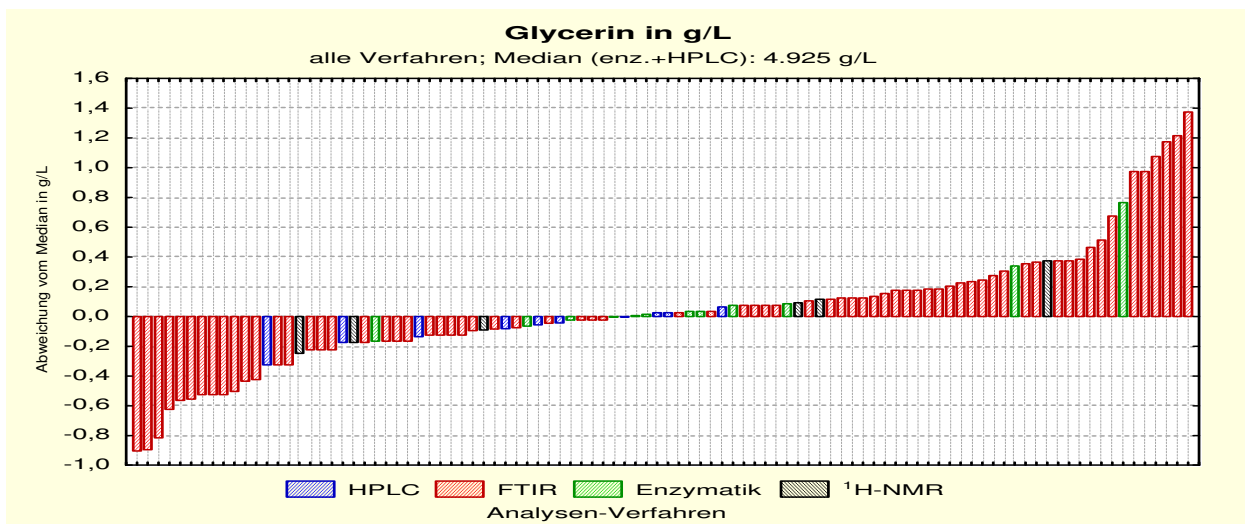
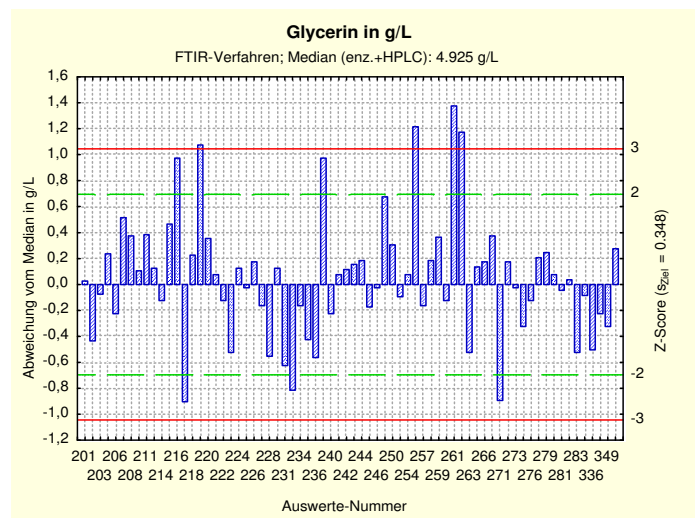
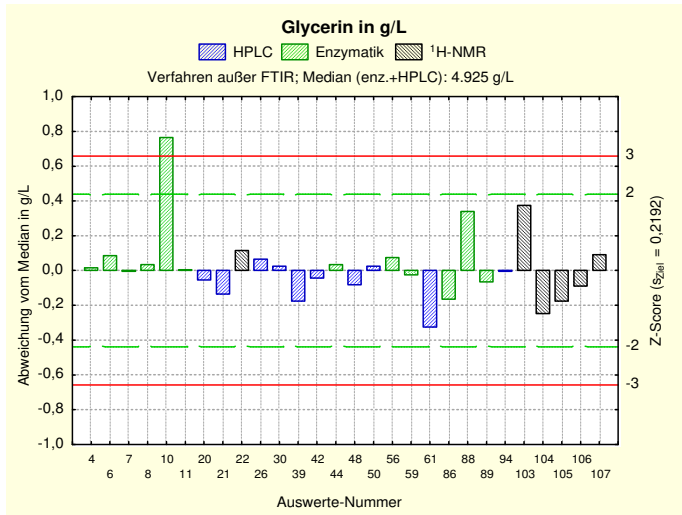
**5.7.4 FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	4,95	0,03	0,11	0,07	
202	FTIR	4,49	-0,43	-1,98	-1,25	
203	FTIR	4,85	-0,08	-0,34	-0,22	
204	FTIR	5,16	0,24	1,07	0,68	
206	FTIR	4,70	-0,22	-1,03	-0,65	
207	FTIR	5,44	0,52	2,35	1,48	
208	FTIR	5,30	0,38	1,71	1,08	
209	FTIR	5,03	0,11	0,48	0,30	
211	FTIR	5,31	0,38	1,76	1,11	
212	FTIR	5,05	0,13	0,57	0,36	
214	FTIR	4,80	-0,13	-0,57	-0,36	
215	FTIR	5,39	0,46	2,12	1,34	
216	FTIR	5,90	0,98	4,45	2,80	
217	FTIR	4,02	-0,91	-4,13	-2,60	
218	FTIR	5,15	0,23	1,03	0,65	
219	FTIR	6,00	1,08	4,91	3,09	
220	FTIR	5,28	0,36	1,62	1,02	
221	FTIR	5,00	0,08	0,34	0,22	
222	FTIR	4,80	-0,13	-0,57	-0,36	
223	FTIR	4,40	-0,52	-2,40	-1,51	
224	FTIR	5,05	0,13	0,57	0,36	
225	FTIR	4,90	-0,02	-0,11	-0,07	
226	FTIR	5,10	0,17	0,80	0,50	
227	FTIR	4,76	-0,17	-0,75	-0,47	
228	FTIR	4,37	-0,55	-2,53	-1,59	
229	FTIR	5,05	0,13	0,57	0,36	
231	FTIR	4,30	-0,63	-2,85	-1,80	
232	FTIR	4,11	-0,81	-3,72	-2,34	
234	FTIR	4,76	-0,17	-0,75	-0,47	
235	FTIR	4,50	-0,42	-1,94	-1,22	
236	FTIR	4,36	-0,56	-2,58	-1,62	
237	FTIR	5,90	0,98	4,45	2,80	
240	FTIR	4,70	-0,22	-1,03	-0,65	
241	FTIR	5,00	0,08	0,34	0,22	
242	FTIR	5,04	0,12	0,52	0,33	
243	FTIR	5,08	0,16	0,71	0,45	
244	FTIR	5,11	0,19	0,84	0,53	
245	FTIR	4,75	-0,17	-0,80	-0,50	
246	FTIR	4,90	-0,02	-0,11	-0,07	
249	FTIR	5,60	0,67	3,08	1,94	
250	FTIR	5,23	0,31	1,39	0,88	
252	FTIR	4,83	-0,09	-0,43	-0,27	
254	FTIR	5,00	0,08	0,34	0,22	
256	FTIR	6,14	1,21	5,54	3,49	
257	FTIR	4,76	-0,17	-0,75	-0,47	
258	FTIR	5,11	0,19	0,84	0,53	
259	FTIR	5,29	0,37	1,67	1,05	
260	FTIR	4,80	-0,13	-0,57	-0,36	
261	FTIR	6,30	1,38	6,27	3,95	
262	FTIR	6,10	1,17	5,36	3,38	
263	FTIR	4,40	-0,52	-2,40	-1,51	
265	FTIR	5,06	0,13	0,62	0,39	
266	FTIR	5,10	0,17	0,80	0,50	
267	FTIR	5,30	0,38	1,71	1,08	
271	FTIR	4,03	-0,89	-4,08	-2,57	
272	FTIR	5,10	0,17	0,80	0,50	
273	FTIR	4,90	-0,02	-0,11	-0,07	
275	FTIR	4,60	-0,33	-1,48	-0,93	
276	FTIR	4,80	-0,13	-0,57	-0,36	
278	FTIR	5,13	0,21	0,94	0,59	
279	FTIR	5,17	0,25	1,12	0,70	
280	FTIR	5,00	0,08	0,34	0,22	
281	FTIR	4,88	-0,04	-0,21	-0,13	
282	FTIR	4,96	0,04	0,16	0,10	
283	FTIR	4,40	-0,52	-2,40	-1,51	
320	FTIR	4,84	-0,08	-0,39	-0,24	



**Fortsetzung: FTIR-Laboreergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
336	FTIR	4,42	-0,50	-2,30	-1,45	
337	FTIR	4,70	-0,22	-1,03	-0,65	
349	FTIR	4,60	-0,33	-1,48	-0,93	
368	FTIR	5,20	0,27	1,25	0,79	



## 5.8 pH-Wert

### 5.8.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
04	potentiometr.	3,28	-0,035	-0,74	
05	potentiometr.	3,35	0,035	0,74	
06	potentiometr.	3,31	-0,005	-0,11	
07	potentiometr.	3,33	0,015	0,32	
08	potentiometr.	3,39	0,075	1,58	
09	potentiometr.	3,33	0,015	0,32	
10	potentiometr.	3,34	0,025	0,53	
11	potentiometr.	3,35	0,035	0,74	
14	potentiometr.	3,33	0,015	0,32	
15	potentiometr.	3,22	-0,095	-2,00	
18	potentiometr.	3,38	0,069	1,45	
20	potentiometr.	3,30	-0,015	-0,32	
21	potentiometr.	3,25	-0,065	-1,37	
22	potentiometr.	3,28	-0,035	-0,74	
24	potentiometr.	3,27	-0,045	-0,95	
25	potentiometr.	3,21	-0,105	-2,21	
26	potentiometr.	3,28	-0,035	-0,74	
27	potentiometr.	3,45	0,135	2,84	
28	potentiometr.	3,40	0,085	1,79	
29	potentiometr.	3,30	-0,015	-0,32	
30	potentiometr.	3,21	-0,105	-2,21	
32	potentiometr.	3,30	-0,015	-0,32	
37	potentiometr.	3,21	-0,105	-2,21	
38	potentiometr.	3,31	-0,005	-0,11	
39	potentiometr.	3,31	0,000	0,00	
40	potentiometr.	3,34	0,020	0,42	
41	potentiometr.	3,31	-0,005	-0,11	
42	potentiometr.	3,41	0,095	2,00	
45	potentiometr.	3,26	-0,055	-1,16	
46	potentiometr.	3,40	0,085	1,79	
48	potentiometr.	3,19	-0,125	-2,63	
49	potentiometr.	3,32	0,005	0,11	
50	potentiometr.	3,33	0,015	0,32	
53	potentiometr.	3,33	0,015	0,32	
56	potentiometr.	3,33	0,015	0,32	
59	potentiometr.	3,43	0,115	2,42	
60	potentiometr.	3,27	-0,045	-0,95	
61	potentiometr.	3,00	-0,315	-6,62	(**)
62	potentiometr.	3,34	0,025	0,53	
64	potentiometr.	3,21	-0,105	-2,21	
69	potentiometr.	3,27	-0,045	-0,95	
77	potentiometr.	3,38	0,065	1,37	
86	potentiometr.	3,35	0,035	0,74	
88	potentiometr.	3,35	0,035	0,74	
101	potentiometr.	3,22	-0,095	-2,00	
102	potentiometr.	3,31	-0,005	-0,11	

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

### 5.8.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
elektrom.	elektrometrisch	46	3,309	0,0672
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	81	3,385	0,0729

**5.8.3 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	3,35	0,035	0,71	
202	FTIR	3,44	0,125	2,54	
203	FTIR	3,44	0,125	2,54	
204	FTIR	3,35	0,035	0,71	
205	FTIR	3,42	0,105	2,13	
206	FTIR	3,39	0,075	1,52	
207	FTIR	3,38	0,065	1,32	
208	FTIR	3,36	0,045	0,91	
209	FTIR	3,34	0,025	0,51	
211	FTIR	3,24	-0,075	-1,52	
212	FTIR	3,42	0,105	2,13	
214	FTIR	3,41	0,095	1,93	
215	FTIR	3,34	0,025	0,51	
216	FTIR	3,53	0,215	4,36	
217	FTIR	3,35	0,035	0,71	
218	FTIR	3,38	0,060	1,22	
219	FTIR	3,53	0,215	4,36	
220	FTIR	3,40	0,085	1,72	
221	FTIR	3,33	0,015	0,30	
222	FTIR	3,28	-0,035	-0,71	
223	FTIR	3,32	0,005	0,10	
224	FTIR	3,34	0,025	0,51	
225	FTIR	3,33	0,015	0,30	
226	FTIR	3,35	0,035	0,71	
227	FTIR	3,42	0,105	2,13	
228	FTIR	3,45	0,135	2,74	
229	FTIR	3,37	0,055	1,12	
231	FTIR	3,39	0,075	1,52	
232	FTIR	3,55	0,235	4,77	
234	FTIR	3,44	0,125	2,54	
235	FTIR	3,33	0,015	0,30	
236	FTIR	3,32	0,005	0,10	
237	FTIR	3,50	0,185	3,75	
240	FTIR	3,42	0,105	2,13	
241	FTIR	3,44	0,125	2,54	
242	FTIR	3,33	0,015	0,30	
243	FTIR	3,43	0,115	2,33	
244	FTIR	3,32	0,005	0,10	
245	FTIR	3,33	0,015	0,30	
246	FTIR	3,42	0,105	2,13	
247	FTIR	3,41	0,095	1,93	
248	FTIR	3,31	-0,005	-0,10	
249	FTIR	3,39	0,075	1,52	
250	FTIR	3,44	0,125	2,54	
251	FTIR	3,37	0,055	1,12	
252	FTIR	3,33	0,015	0,30	
254	FTIR	3,43	0,115	2,33	
256	FTIR	3,41	0,095	1,93	
257	FTIR	3,44	0,125	2,54	
258	FTIR	3,31	-0,005	-0,10	
259	FTIR	3,29	-0,025	-0,51	
260	FTIR	3,52	0,205	4,16	
261	FTIR	3,25	-0,065	-1,32	
262	FTIR	3,52	0,205	4,16	
263	FTIR	3,40	0,085	1,72	
264	FTIR	3,47	0,155	3,14	
265	FTIR	3,39	0,075	1,52	
266	FTIR	3,25	-0,065	-1,32	
267	FTIR	3,44	0,125	2,54	
268	FTIR	3,38	0,060	1,22	
269	FTIR	3,24	-0,075	-1,52	
270	FTIR	3,38	0,065	1,32	
271	FTIR	3,47	0,155	3,14	
272	FTIR	3,11	-0,205	-4,16	
273	FTIR	3,35	0,035	0,71	
274	FTIR	3,44	0,125	2,54	

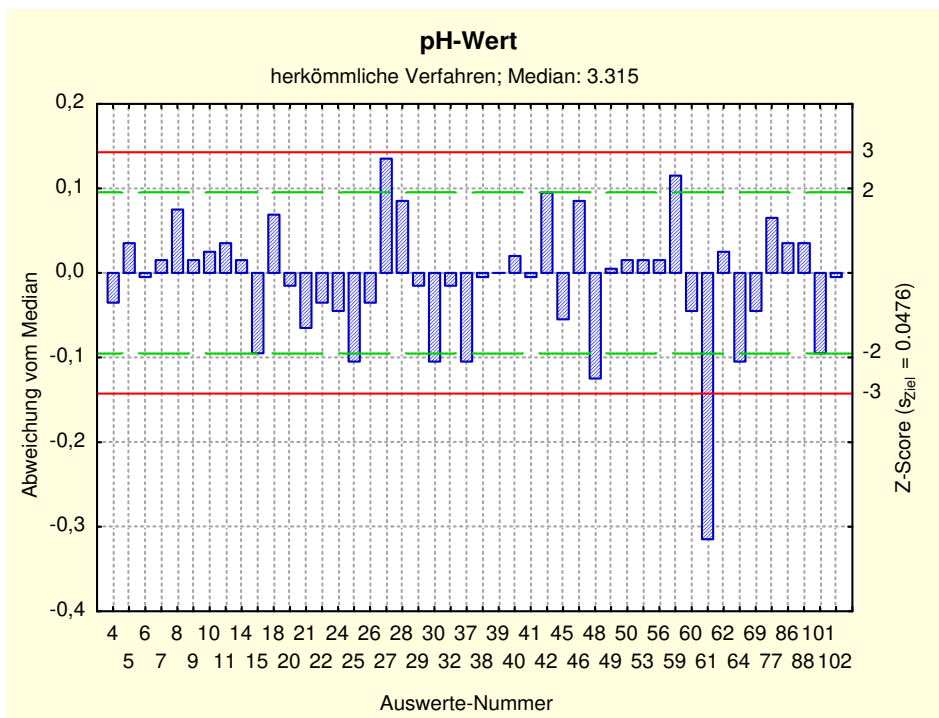
**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

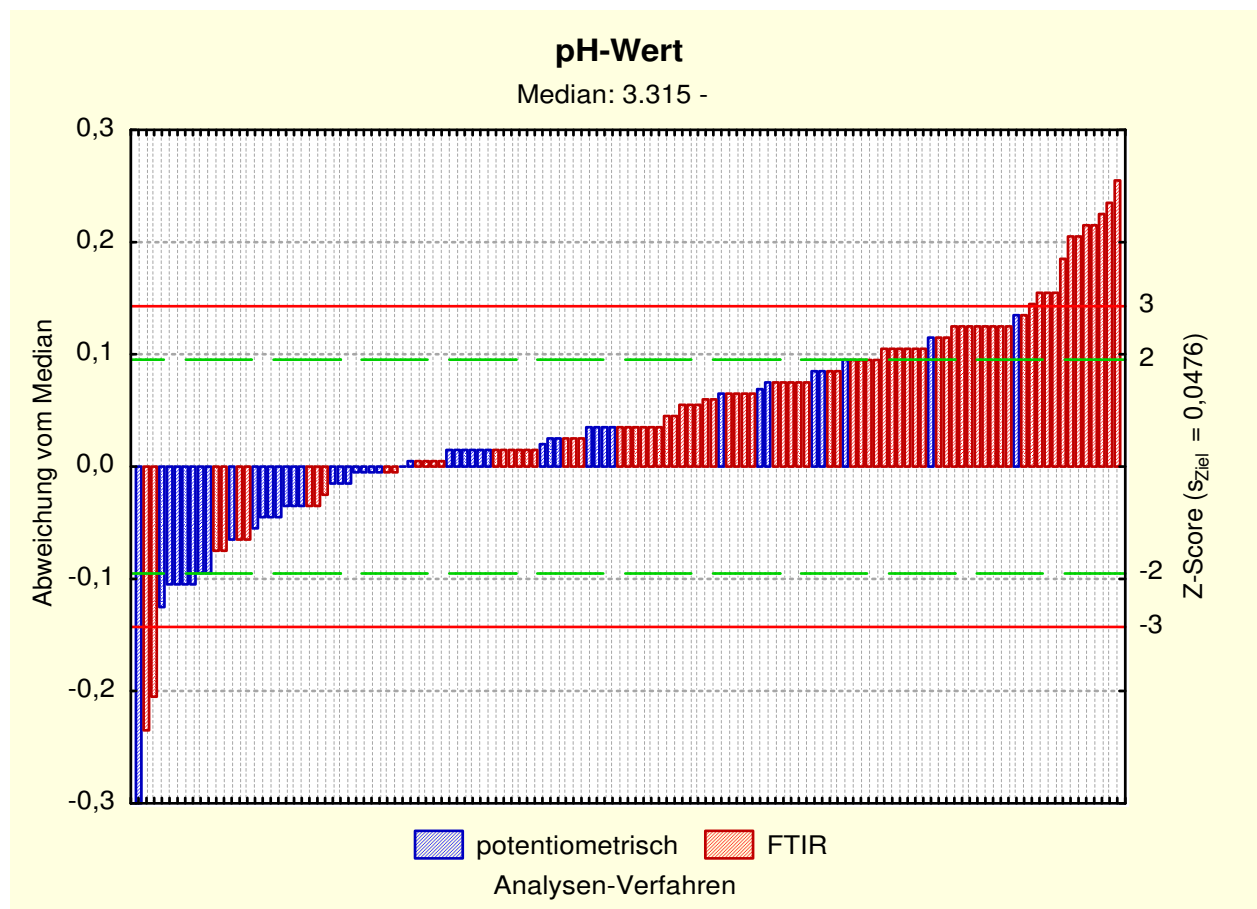
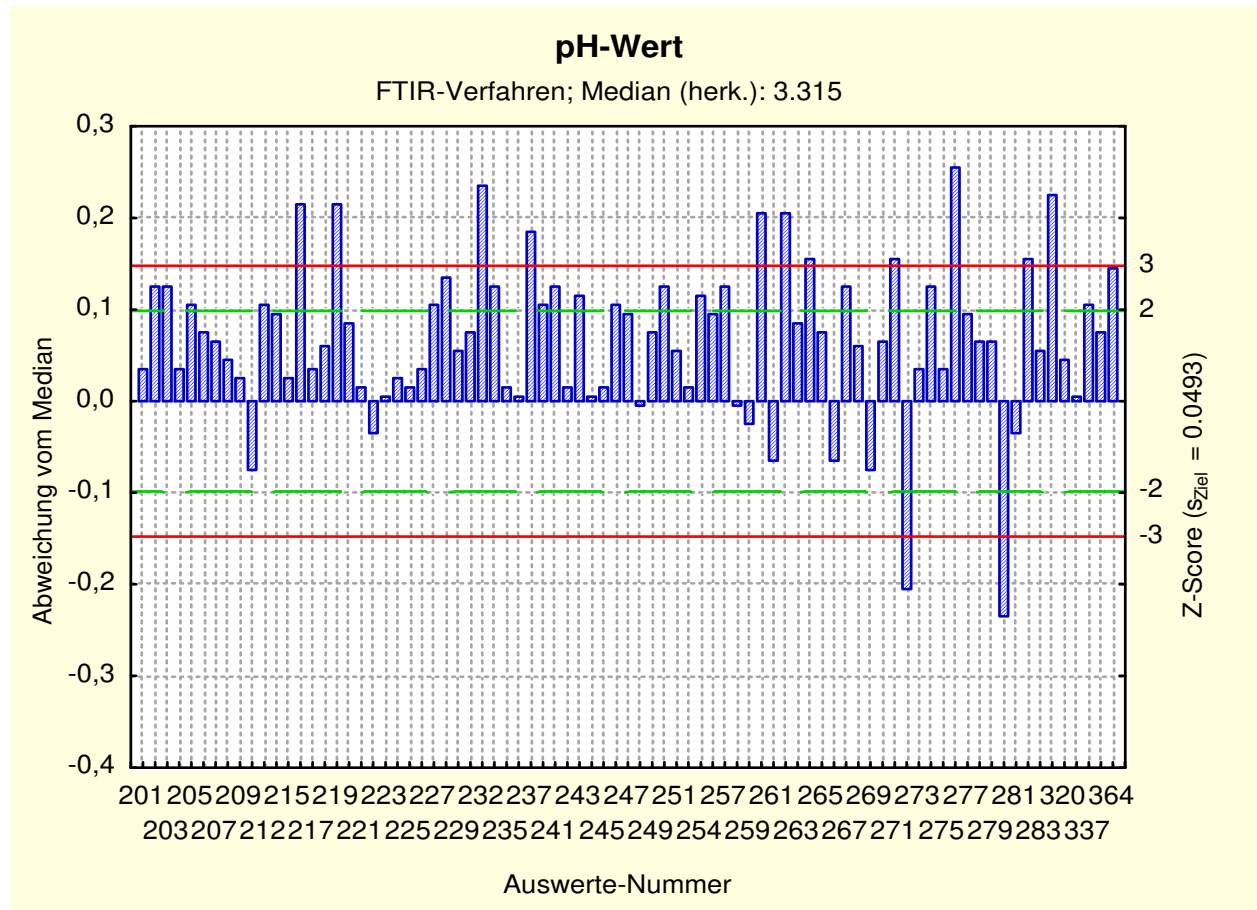
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score exper.	Hinweis
275	FTIR	3,35	0,035	0,71	
276	FTIR	3,57	0,255	5,17	(**)
277	FTIR	3,41	0,095	1,93	
278	FTIR	3,38	0,065	1,32	
279	FTIR	3,38	0,065	1,32	
280	FTIR	3,08	-0,235	-4,77	
281	FTIR	3,28	-0,035	-0,71	
282	FTIR	3,47	0,155	3,14	
283	FTIR	3,37	0,055	1,12	
319	FTIR	3,54	0,225	4,56	
320	FTIR	3,36	0,045	0,91	
336	FTIR	3,32	0,005	0,10	
337	FTIR	3,42	0,105	2,13	
349	FTIR	3,39	0,075	1,52	
364	FTIR	3,46	0,145	2,94	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

**5.8.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für pH-Wert	alle Daten	ber. Daten
Gültige Werte	46	45
Minimalwert	3,00	3,19
Mittelwert	3,305	3,312
Median	3,313	3,315
Maximalwert	3,45	3,45
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,0772	0,0626
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,0114	0,0093
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,0476	0,0476
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,0493	0,0493
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,62	1,32
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	1,57	1,27
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,24	0,20
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,23	0,19





## 5.9 Gesamtsäure [g/L]

### 5.9.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
04	phot.aut.	4,43	-0,165	-0,80	-1,54	
05	LwK 5.2.1	4,52	-0,080	-0,39	-0,75	
06	LwK 5.1	4,42	-0,180	-0,87	-1,68	
07	LwK 5.2.1	4,50	-0,100	-0,48	-0,93	
08	LwK 5.2.1	5,12	0,520	2,51	4,85	
09	LwK 5.2.1	4,52	-0,080	-0,39	-0,75	
10	LwK 5.2.1	4,47	-0,130	-0,63	-1,21	
11	LwK 5.1	4,45	-0,150	-0,73	-1,40	
14	LwK 5.1	4,84	0,240	1,16	2,24	
15	LwK 5.2.1	4,6	0,000	0,00	0,00	
18	LwK 5.2.1	4,71	0,110	0,53	1,03	
19	LwK 5.1	4,49	-0,110	-0,53	-1,03	
20	LwK 5.1	4,65	0,050	0,24	0,47	
21	LwK 5.1	4,55	-0,050	-0,24	-0,47	
22	LwK 5.1	4,50	-0,100	-0,48	-0,93	
23	LwK 5.1	5,00	0,400	1,93	3,73	
24	LwK 5.1	4,80	0,200	0,97	1,87	
25	LwK 5.1	4,69	0,090	0,44	0,84	
26	LwK 5.1	4,60	0,000	0,00	0,00	
27	LwK 5.1	4,60	0,000	0,00	0,00	
28	LwK 5.1	4,80	0,200	0,97	1,87	
29	LwK 5.2.1	4,66	0,060	0,29	0,56	
30	LwK 5.1	4,70	0,100	0,48	0,93	
31	LwK 5.1	4,70	0,100	0,48	0,93	
32	LwK 5.1	4,70	0,100	0,48	0,93	
34	LwK 5.2.1	4,60	0,000	0,00	0,00	
37	LwK 5.1	4,69	0,090	0,44	0,84	
38	LwK 5.1	4,60	0,000	0,00	0,00	
39	LwK 5.2.1	4,66	0,060	0,29	0,56	
40	LwK 5.1	4,53	-0,070	-0,34	-0,65	
41	LwK 5.1	4,60	0,000	0,00	0,00	
42	LwK 5.1	4,52	-0,080	-0,39	-0,75	
45	LwK 5.1	4,57	-0,030	-0,15	-0,28	
46	LwK 5.1	4,90	0,300	1,45	2,80	
48	LwK 5.1	4,50	-0,100	-0,48	-0,93	
49	LwK 5.1	4,95	0,350	1,69	3,27	
50	LwK 5.1	4,56	-0,040	-0,19	-0,37	
52	LwK 5.2.1	4,80	0,200	0,97	1,87	
53	LwK 5.2.1	4,60	0,000	0,00	0,00	
55	LwK 5.2.2	5,02	0,420	2,03	3,92	
56	LwK 5.2.1	4,54	-0,060	-0,29	-0,56	
59	LwK 5.1	4,51	-0,090	-0,44	-0,84	
60	LwK 5.2.1	5,00	0,400	1,93	3,73	
61	LwK 5.1	4,70	0,100	0,48	0,93	
62	LwK 5.1	4,80	0,200	0,97	1,87	
64	LwK 5.1	4,77	0,170	0,82	1,59	
69	LwK 5.2.1	4,93	0,330	1,60	3,08	
77	LwK 5.2.2	4,5	-0,100	-0,48	-0,93	
86	LwK 5.2.1	4,43	-0,170	-0,82	-1,59	
87	LwK 5.2.1	4,68	0,080	0,39	0,75	
101	LwK 5.1	4,65	0,050	0,24	0,47	
102	LwK 5.2.1	4,50	-0,100	-0,48	-0,93	

**5.9.2 FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	LwK 5.3	4,63	0,030	0,15	0,21	
202	LwK 5.3	4,74	0,140	0,68	0,97	
203	LwK 5.3	4,61	0,010	0,05	0,07	
204	LwK 5.3	4,61	0,007	0,03	0,05	
205	LwK 5.3	4,94	0,340	1,64	2,34	
206	LwK 5.3	4,52	-0,080	-0,39	-0,55	
207	LwK 5.3	4,69	0,090	0,44	0,62	
208	LwK 5.3	4,90	0,300	1,45	2,07	
209	LwK 5.3	4,64	0,040	0,19	0,28	
210	LwK 5.3	4,53	-0,070	-0,34	-0,48	
211	LwK 5.3	4,72	0,120	0,58	0,83	
212	LwK 5.3	4,86	0,260	1,26	1,79	
214	LwK 5.3	4,90	0,300	1,45	2,07	
215	LwK 5.3	4,91	0,310	1,50	2,14	
216	LwK 5.3	4,70	0,100	0,48	0,69	
217	LwK 5.3	4,74	0,140	0,68	0,97	
218	LwK 5.3	4,68	0,080	0,39	0,55	
219	LwK 5.3	4,90	0,300	1,45	2,07	
220	LwK 5.3	4,77	0,170	0,82	1,17	
221	LwK 5.3	4,75	0,150	0,73	1,03	
222	LwK 5.3	4,80	0,200	0,97	1,38	
223	LwK 5.3	5,00	0,400	1,93	2,76	
224	LwK 5.3	4,85	0,250	1,21	1,72	
225	LwK 5.3	4,78	0,180	0,87	1,24	
226	LwK 5.3	4,60	0,000	0,00	0,00	
227	LwK 5.3	4,88	0,280	1,35	1,93	
228	LwK 5.3	4,80	0,200	0,97	1,38	
229	LwK 5.3	4,86	0,260	1,26	1,79	
231	LwK 5.3	4,77	0,170	0,82	1,17	
232	LwK 5.3	4,94	0,340	1,64	2,34	
234	LwK 5.3	4,58	-0,020	-0,10	-0,14	
235	LwK 5.3	4,50	-0,100	-0,48	-0,69	
236	LwK 5.3	5,05	0,450	2,18	3,10	
237	LwK 5.3	4,70	0,100	0,48	0,69	
240	LwK 5.3	4,92	0,320	1,55	2,21	
241	LwK 5.3	4,90	0,300	1,45	2,07	
242	LwK 5.3	4,65	0,050	0,24	0,34	
243	LwK 5.3	4,60	0,000	0,00	0,00	
244	LwK 5.3	4,77	0,170	0,82	1,17	
245	LwK 5.3	4,70	0,100	0,48	0,69	
246	LwK 5.3	4,80	0,200	0,97	1,38	
247	LwK 5.3	4,67	0,070	0,34	0,48	
248	LwK 5.3	5,11	0,510	2,47	3,52	
249	LwK 5.3	4,80	0,200	0,97	1,38	
250	LwK 5.3	4,77	0,170	0,82	1,17	
251	LwK 5.3	4,83	0,230	1,11	1,59	
252	LwK 5.3	4,92	0,320	1,55	2,21	
254	LwK 5.3	4,90	0,300	1,45	2,07	
255	LwK 5.3	5,00	0,400	1,93	2,76	
256	LwK 5.3	4,83	0,230	1,11	1,59	
257	LwK 5.3	4,70	0,100	0,48	0,69	
258	LwK 5.3	5,02	0,420	2,03	2,90	
259	LwK 5.3	4,86	0,260	1,26	1,79	
260	LwK 5.3	4,60	0,000	0,00	0,00	
261	LwK 5.3	4,80	0,200	0,97	1,38	
262	LwK 5.3	4,50	-0,100	-0,48	-0,69	
263	LwK 5.3	4,50	-0,100	-0,48	-0,69	
264	LwK 5.3	4,60	0,000	0,00	0,00	
265	LwK 5.3	4,72	0,120	0,58	0,83	
266	LwK 5.3	4,63	0,030	0,15	0,21	
267	LwK 5.3	4,78	0,180	0,87	1,24	
268	LwK 5.3	4,67	0,075	0,36	0,52	
269	LwK 5.3	4,70	0,100	0,48	0,69	
270	LwK 5.3	4,90	0,300	1,45	2,07	
271	LwK 5.3	5,09	0,490	2,37	3,38	

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
272	LwK 5.3	4,50	-0,100	-0,48	-0,69	
273	LwK 5.3	4,56	-0,040	-0,19	-0,28	
274	LwK 5.3	4,94	0,340	1,64	2,34	
275	LwK 5.3	4,80	0,200	0,97	1,38	
276	LwK 5.3	4,40	-0,200	-0,97	-1,38	
277	LwK 5.3	4,77	0,170	0,82	1,17	
278	LwK 5.3	4,74	0,140	0,68	0,97	
279	LwK 5.3	4,48	-0,120	-0,58	-0,83	
280	LwK 5.3	4,80	0,200	0,97	1,38	
281	LwK 5.3	4,68	0,080	0,39	0,55	
282	LwK 5.3	4,92	0,320	1,55	2,21	
283	LwK 5.3	4,80	0,200	0,97	1,38	
312	LwK 5.3	4,76	0,160	0,77	1,10	
319	LwK 5.3	4,90	0,300	1,45	2,07	
320	LwK 5.3	4,73	0,130	0,63	0,90	
323	LwK 5.3	5,00	0,400	1,93	2,76	
336	LwK 5.3	5,09	0,490	2,37	3,38	
337	LwK 5.3	4,70	0,100	0,48	0,69	
343	LwK 5.3	4,86	0,260	1,26	1,79	
349	LwK 5.3	4,90	0,300	1,45	2,07	
364	LwK 5.3	4,80	0,200	0,97	1,38	
368	LwK 5.3	4,60	0,000	0,00	0,00	

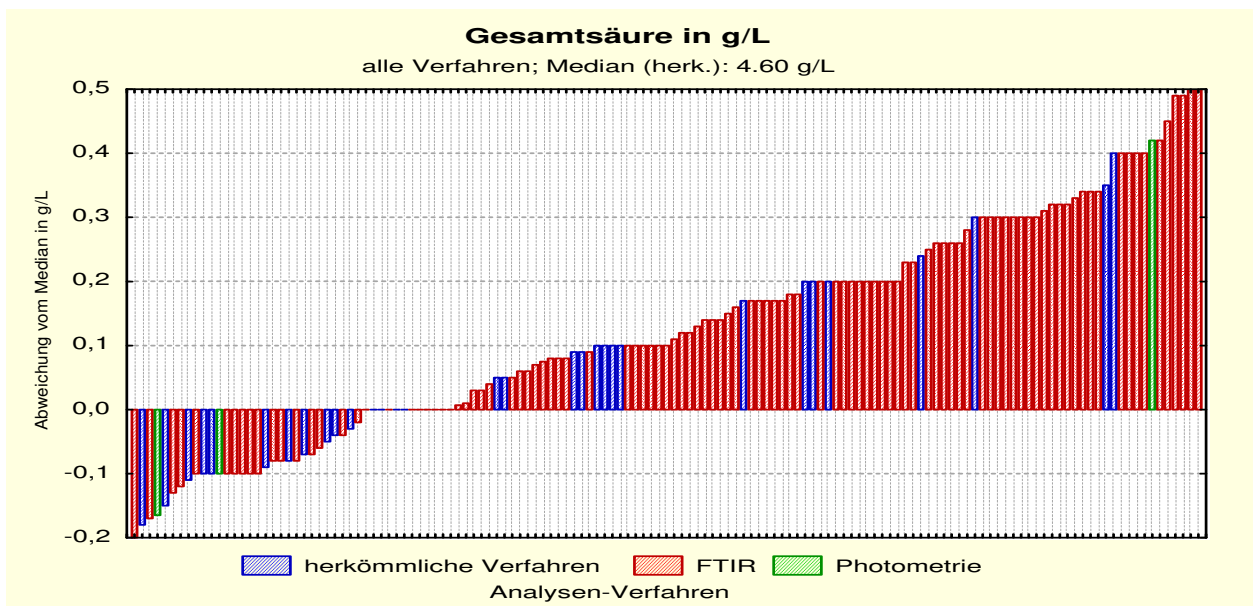
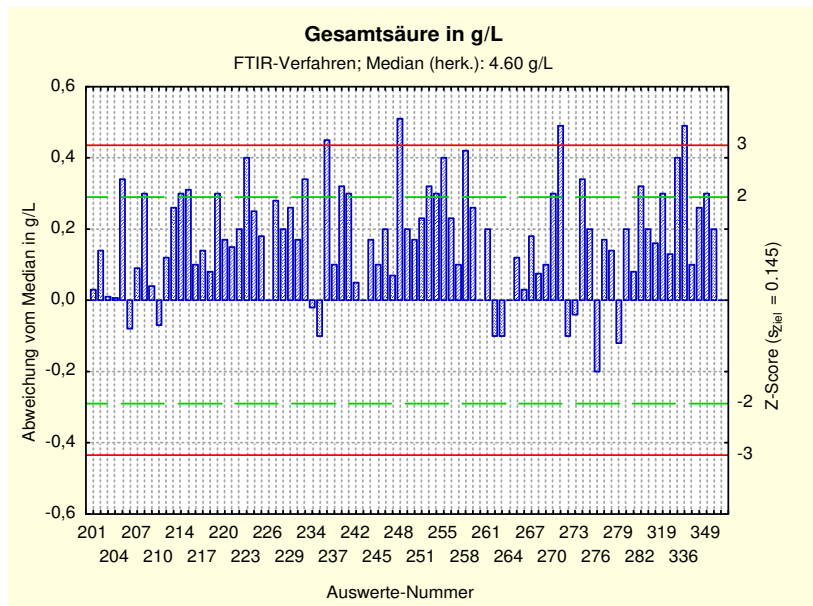
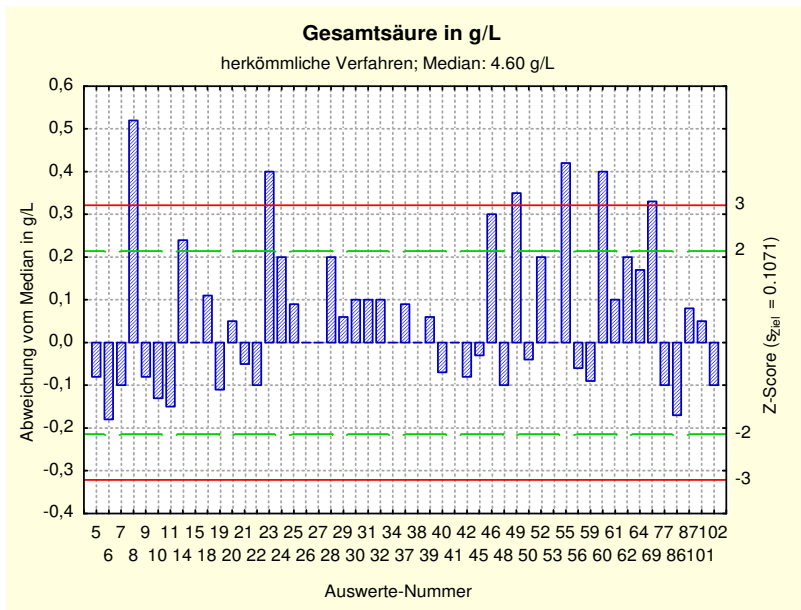
**5.9.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Gesamtsäure [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	51
Minimalwert	4,42
Mittelwert	4,661
Median	4,600
Maximalwert	5,12
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,170
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,024
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,207
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	0,107
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	0,145
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	0,82
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	1,58
Quotient ( $s_L/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	1,17
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,11
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	0,22
Quotient ( $u_M/s_{\ddot{U}\ FTIR}$ )	0,16

**5.9.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 5.1	Potentiometrische Bestimmung n. AVV	31	4,649	0,151
LwK 5.2.1	OIV-MA-AS-313-01, - Nr. 5.2, Potentiometrische Bestimmung	18	4,636	0,168
LwK 5.2.2	- Nr. 5.3, Endpunktbestimmung mit Indikator herkömmliche Verfahren	2	4,760	0,417
		51	4,646	0,159
LwK 5.3	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	87	4,768	0,160
phot.aut.	photometrisch m. Bromkresolpurpur, automatisiert	1	4,435	





## 5.10 Weinsäure [g/L]

### 5.10.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsgrundlage sind die mittels HPLC und IC erhaltenen Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	HPLC	2,31	0,055	0,49	
02	IC	2,20	-0,055	-0,49	
05	photometr.	2,25	-0,005	-0,04	
06	HPLC	2,16	-0,095	-0,84	
07	HPLC	2,26	0,005	0,04	
08	HPLC	2,25	-0,005	-0,04	
10	photometr., autom.	2,35	0,095	0,84	
11	photometr.	2,43	0,175	1,55	
15	photometr., autom.	2,5	0,245	2,17	
21	HPLC	2,44	0,185	1,64	
22	NMR	2,44	0,185	1,64	
24	HPLC	2,13	-0,125	-1,11	
25	photometr., autom.	2,28	0,025	0,22	
26	HPLC	2,26	0,005	0,04	
29	photometr., autom.	2,30	0,045	0,40	
38	photometr., autom.	2,30	0,045	0,40	
39	HPLC	2,31	0,055	0,49	
40	photometr., autom.	2,35	0,095	0,84	
44	photometr., autom.	2,56	0,305	2,70	
45	photometr., autom.	2,60	0,345	3,06	
48	photometr., autom.	2,30	0,045	0,40	
50	HPLC	2,23	-0,025	-0,22	
56	photometr., autom.	2,52	0,265	2,35	
59	HPLC	2,16	-0,093	-0,82	
61	photometr., autom.	2,22	-0,035	-0,31	
69	photometr., autom.	2,34	0,085	0,75	
92	photometr., autom.	2,32	0,065	0,58	
94	HPLC	2,27	0,015	0,13	
97	photometr.	2,17	-0,080	-0,71	
103	NMR	2,10	-0,155	-1,37	
104	NMR	1,71	-0,541	-4,80	
105	NMR	1,81	-0,445	-3,94	
106	NMR	1,55	-0,703	-6,23	(**)
107	NMR	1,92	-0,332	-2,94	

(\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Bezugswert ab.

### 5.10.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	2,31	0,055	0,49	0,24	
202	FTIR	2,28	0,025	0,22	0,11	
203	FTIR	1,95	-0,305	-2,70	-1,34	
204	FTIR	2,53	0,279	2,47	1,23	
205	FTIR	2,54	0,285	2,53	1,26	
206	FTIR	2,52	0,265	2,35	1,17	
208	FTIR	2,30	0,045	0,40	0,20	
209	FTIR	2,29	0,035	0,31	0,15	
211	FTIR	2,35	0,095	0,84	0,42	
212	FTIR	1,80	-0,455	-4,03	-2,00	
214	FTIR	2,20	-0,055	-0,49	-0,24	
215	FTIR	2,27	0,015	0,13	0,07	
216	FTIR	4,70	2,445	21,66	10,77	(*)
217	FTIR	2,41	0,155	1,37	0,68	
218	FTIR	2,32	0,065	0,58	0,29	
219	FTIR	2,40	0,145	1,28	0,64	
220	FTIR	2,08	-0,175	-1,55	-0,77	
221	FTIR	1,22	-1,035	-9,17	-4,56	
222	FTIR	2,38	0,125	1,11	0,55	
223	FTIR	2,30	0,045	0,40	0,20	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der mit HPLC und IC erhaltenen Werte ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
224	FTIR	2,42	0,165	1,46	0,73	
225	FTIR	2,07	-0,185	-1,64	-0,81	
226	FTIR	2,50	0,245	2,17	1,08	
227	FTIR	2,44	0,185	1,64	0,81	
228	FTIR	2,58	0,325	2,88	1,43	
229	FTIR	2,41	0,155	1,37	0,68	
231	FTIR	2,63	0,375	3,32	1,65	
232	FTIR	2,37	0,115	1,02	0,51	
234	FTIR	2,74	0,485	4,30	2,14	
235	FTIR	0,70	-1,555	-13,78	-6,85	(*)
236	FTIR	2,22	-0,035	-0,31	-0,15	
237	FTIR	2,50	0,245	2,17	1,08	
240	FTIR	2,40	0,145	1,28	0,64	
241	FTIR	2,40	0,145	1,28	0,64	
242	FTIR	2,81	0,555	4,92	2,44	
243	FTIR	1,89	-0,365	-3,23	-1,61	
244	FTIR	2,54	0,285	2,53	1,26	
245	FTIR	2,17	-0,085	-0,75	-0,37	
246	FTIR	2,40	0,145	1,28	0,64	
247	FTIR	2,16	-0,095	-0,84	-0,42	
249	FTIR	2,40	0,145	1,28	0,64	
250	FTIR	2,28	0,025	0,22	0,11	
252	FTIR	2,50	0,245	2,17	1,08	
254	FTIR	2,20	-0,055	-0,49	-0,24	
256	FTIR	2,38	0,125	1,11	0,55	
257	FTIR	2,89	0,635	5,63	2,80	
258	FTIR	2,69	0,435	3,85	1,92	
259	FTIR	2,23	-0,025	-0,22	-0,11	
260	FTIR	2,30	0,045	0,40	0,20	
261	FTIR	2,40	0,145	1,28	0,64	
262	FTIR	2,50	0,245	2,17	1,08	
264	FTIR	1,30	-0,955	-8,46	-4,21	
265	FTIR	2,34	0,085	0,75	0,37	
266	FTIR	2,37	0,115	1,02	0,51	
267	FTIR	2,25	-0,005	-0,04	-0,02	
268	FTIR	2,45	0,195	1,73	0,86	
269	FTIR	2,07	-0,185	-1,64	-0,81	
270	FTIR	2,30	0,045	0,40	0,20	
271	FTIR	2,33	0,075	0,66	0,33	
272	FTIR	2,30	0,045	0,40	0,20	
273	FTIR	2,37	0,115	1,02	0,51	
274	FTIR	2,17	-0,085	-0,75	-0,37	
275	FTIR	2,20	-0,055	-0,49	-0,24	
276	FTIR	2,60	0,345	3,06	1,52	
277	FTIR	2,37	0,115	1,02	0,51	
278	FTIR	2,66	0,405	3,59	1,78	
279	FTIR	2,44	0,185	1,64	0,81	
280	FTIR	2,20	-0,055	-0,49	-0,24	
282	FTIR	2,55	0,295	2,61	1,30	
283	FTIR	2,60	0,345	3,06	1,52	
319	FTIR	2,60	0,345	3,06	1,52	
320	FTIR	2,72	0,465	4,12	2,05	
336	FTIR	2,24	-0,015	-0,13	-0,07	
337	FTIR	1,90	-0,355	-3,15	-1,56	
349	FTIR	2,80	0,545	4,83	2,40	
364	FTIR	1,40	-0,855	-7,58	-3,77	

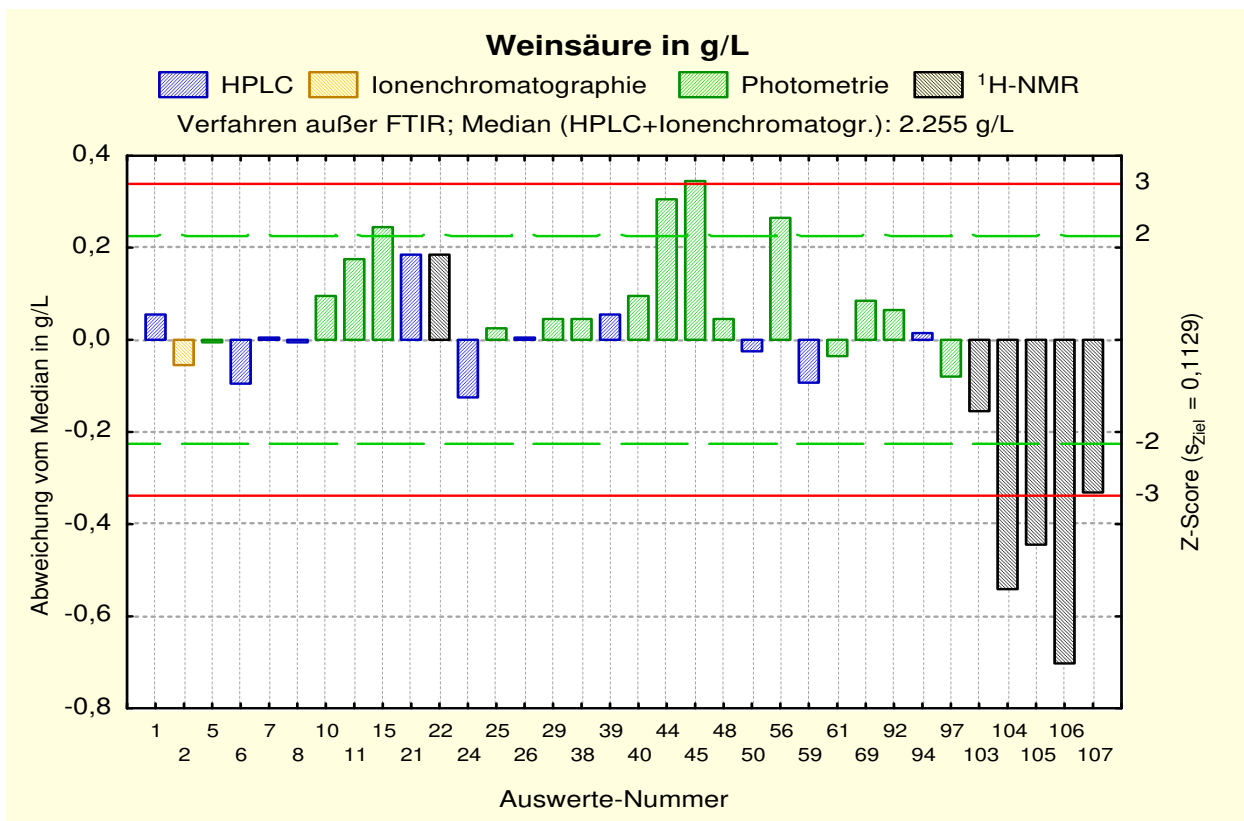
(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der mit HPLC + IC erhaltenen Werte ab.

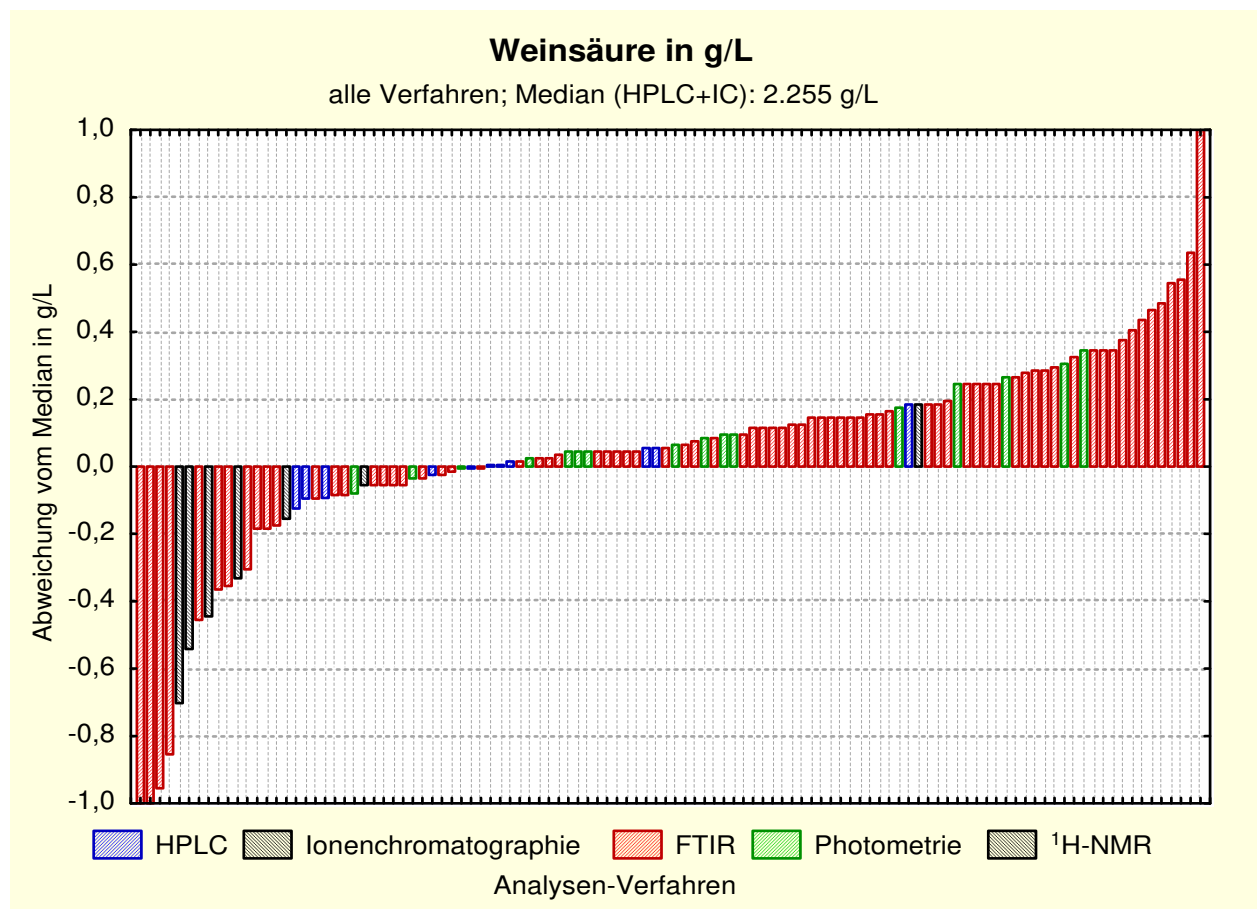
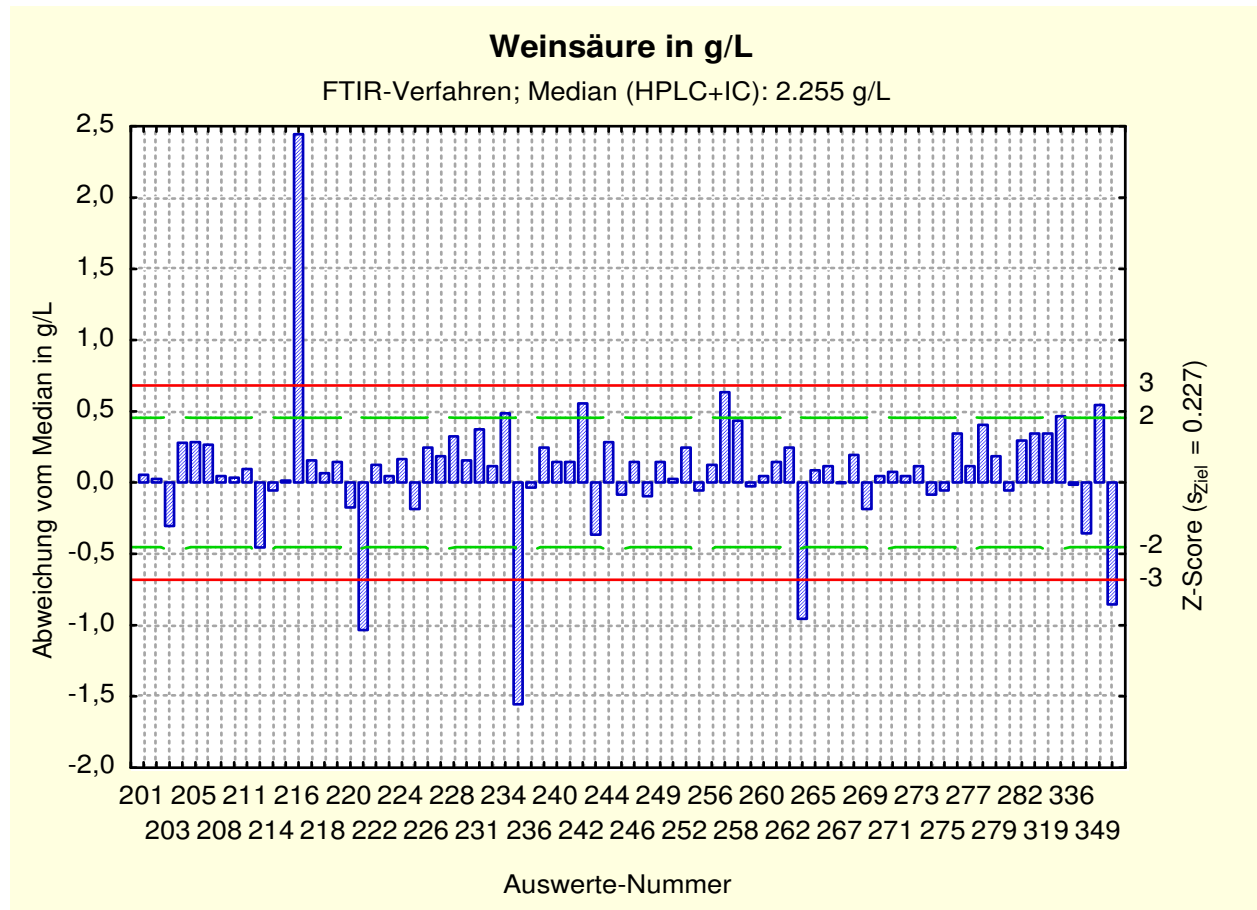
**5.10.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse für Weinsäure [g/L]	HPLC + IC alle Daten	herk. Verfahren alle Daten
Gültige Werte	12	28
Minimalwert	2,13	2,13
Mittelwert	2,248	2,313
Median	2,255	2,300
Maximalwert	2,44	2,60
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,084	0,122
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,024	0,023
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,113	0,115
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )		
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,227	0,227
Horvat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	0,74	1,06
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )		
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,37	0,54
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,21	0,20
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )		
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,11	0,10

**5.10.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	11	2,247	0,082
IC	Ionenchromatographie	1	2,200	
	HPLC + IC	12	2,242	0,0774
photometr.	photometrisch n. Rebelein	3	2,281	0,140
phot. autom.	photometrisch, automatisiert (Vanadat)	13	2,376	0,129
	alle herkömmlichen Verfahren	28	2,304	0,112
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	76	2,360	0,223
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	1,921	0,351





## 5.11 Flüchtige Säure [g/L]

### 5.11.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Bewertungsbasis Werte mit SO<sub>2</sub>-Korrektur oder Ausschluss und experimentelle Zielstandardabweichung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
02	OIV SO2-korr.	0,206	-0,0720	-3,78	-2,52	
06	Gerhardt SO2 korr.	0,282	0,0040	0,21	0,14	
07	Halbmikro SO2 korr.	0,285	0,0070	0,37	0,24	
08	OIV o. SO2-korr.	0,320	0,0420	2,20	1,47	
09	OIV SO2-korr.	0,161	-0,1170	-6,14	-4,10	
10	Halbmikro SO2 korr.	0,278	0,0000	0,00	0,00	
20	Gerhardt SO2 korr.	0,350	0,0720	3,78	2,52	
21	Halbmikro SO2 unber.	0,400	0,1220	6,40	4,27	
24	OIV o. SO2-korr.	0,130	-0,1480	-7,76	-5,18	(**)
25	Gerhardt SO2 korr.	0,180	-0,0980	-5,14	-3,43	
26	Gerhardt SO2 ausg.	0,350	0,0720	3,78	2,52	
28	Wädenswil SO2 korr.	0,232	-0,0460	-2,41	-1,61	
29	Gerhardt SO2 korr.	0,440	0,1620	8,50	5,67	(*)
30	Gerhardt SO2 korr.	0,210	-0,0680	-3,57	-2,38	
31	Halbmikro SO2 korr.	0,330	0,0520	2,73	1,82	
32	Halbmikro SO2 unber.	0,360	0,0820	4,30	2,87	
38	Gerhardt SO2 korr.	0,244	-0,0340	-1,78	-1,19	
39	Gerhardt SO2 korr.	0,271	-0,0070	-0,37	-0,25	
40	Gerhardt SO2 ausg.	0,423	0,1450	7,60	5,07	(*)
41	Gerhardt SO2 ausg.	0,285	0,0073	0,38	0,26	
42	Halbmikro SO2 unber.	0,310	0,0320	1,68	1,12	
45	Gerhardt SO2 ausg.	0,385	0,1070	5,61	3,74	
49	Gerhardt SO2 unber.	0,410	0,1320	6,92	4,62	
50	Halbmikro SO2 korr.	0,202	-0,0760	-3,99	-2,66	
56	Rentschler mod. korr.	0,215	-0,0630	-3,30	-2,20	
60	Wädenswil SO2 unber.	0,420	0,1420	7,45	4,97	
66	Wädenswil SO2 unber.	0,350	0,0720	3,78	2,52	
68	Wädenswil SO2 unber.	0,350	0,0720	3,78	2,52	
88	OIV SO2-korr.	0,345	0,0670	3,51	2,34	
89	Halbmikro SO2 korr.	0,279	0,0010	0,05	0,04	
101	Halbmikro SO2 unber.	0,450	0,1720	9,02	6,02	(**)

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Bewertungsbasis ab und bleiben unberücksichtigt.

(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Bewertungsbasis ab.

### 5.11.2 FTIR-Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,350	0,0710	3,71	0,80	
202	FTIR	0,180	-0,0990	-5,18	-1,11	
203	FTIR	0,280	0,0010	0,05	0,01	
204	FTIR	0,330	0,0510	2,67	0,57	
205	FTIR	0,200	-0,0790	-4,13	-0,89	
206	FTIR	0,280	0,0010	0,05	0,01	
208	FTIR	0,160	-0,1190	-6,22	-1,34	
209	FTIR	0,205	-0,0740	-3,87	-0,83	
210	FTIR	0,140	-0,1390	-7,27	-1,56	
211	FTIR	0,380	0,1010	5,28	1,13	
214	FTIR	0,200	-0,0790	-4,13	-0,89	
215	FTIR	0,210	-0,0690	-3,61	-0,77	
216	FTIR	0,230	-0,0490	-2,56	-0,55	
217	FTIR	0,290	0,0110	0,58	0,12	
218	FTIR	0,200	-0,0790	-4,13	-0,89	
219	FTIR	0,520	0,2410	12,60	2,70	
220	FTIR	0,300	0,0210	1,10	0,24	
221	FTIR	0,300	0,0210	1,10	0,24	
223	FTIR	0,360	0,0810	4,24	0,91	
224	FTIR	0,130	-0,1490	-7,79	-1,67	
225	FTIR	0,198	-0,0810	-4,24	-0,91	

**Fortsetzung: FTIR-Laboregebnisse**

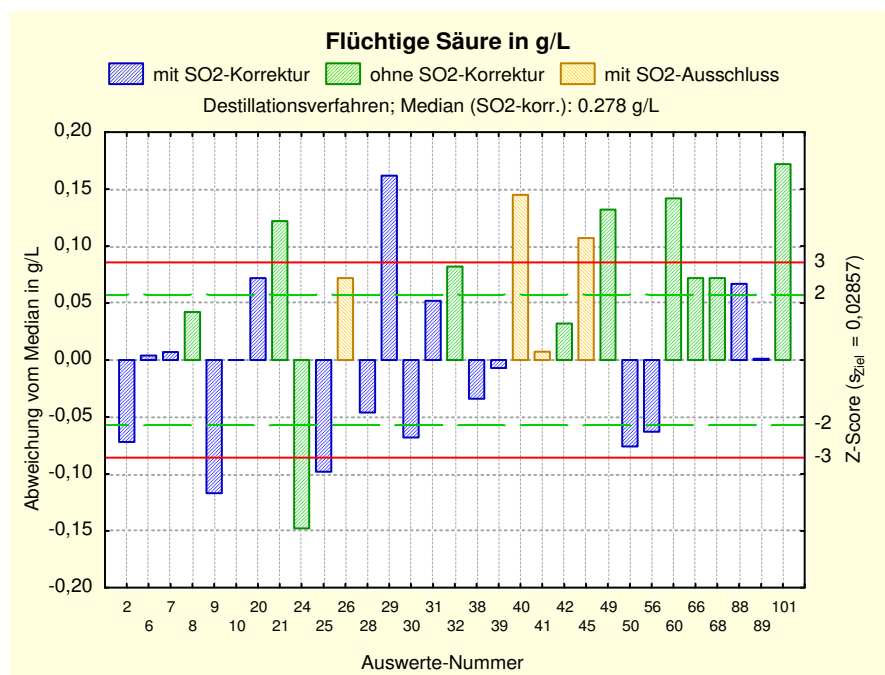
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
226	FTIR	0,150	-0,1290	-6,74	-1,45	
227	FTIR	0,460	0,1810	9,46	2,03	
228	FTIR	0,200	-0,0790	-4,13	-0,89	
229	FTIR	0,342	0,0630	3,29	0,71	
231	FTIR	0,260	-0,0190	-0,99	-0,21	
232	FTIR	0,350	0,0710	3,71	0,80	
234	FTIR	0,230	-0,0490	-2,56	-0,55	
235	FTIR	0,510	0,2310	12,08	2,59	
236	FTIR	0,290	0,0110	0,58	0,12	
237	FTIR	0,440	0,1610	8,42	1,81	
240	FTIR	0,370	0,0910	4,76	1,02	
241	FTIR	0,270	-0,0090	-0,47	-0,10	
242	FTIR	0,290	0,0110	0,58	0,12	
243	FTIR	0,270	-0,0090	-0,47	-0,10	
244	FTIR	0,380	0,1010	5,28	1,13	
245	FTIR	0,420	0,1410	7,37	1,58	
246	FTIR	0,380	0,1010	5,28	1,13	
247	FTIR	0,250	-0,0290	-1,52	-0,33	
249	FTIR	0,390	0,1110	5,80	1,25	
250	FTIR	0,080	-0,1990	-10,40	-2,23	
251	FTIR	0,330	0,0510	2,67	0,57	
252	FTIR	0,190	-0,0890	-4,65	-1,00	
254	FTIR	0,340	0,0610	3,19	0,68	
256	FTIR	0,110	-0,1690	-8,84	-1,90	
257	FTIR	0,410	0,1310	6,85	1,47	
258	FTIR	0,240	-0,0390	-2,04	-0,44	
260	FTIR	0,310	0,0310	1,62	0,35	
261	FTIR	0,220	-0,0590	-3,08	-0,66	
262	FTIR	0,170	-0,1090	-5,70	-1,22	
263	FTIR	0,290	0,0110	0,58	0,12	
264	FTIR	0,180	-0,0990	-5,18	-1,11	
265	FTIR	0,150	-0,1290	-6,74	-1,45	
266	FTIR	0,320	0,0410	2,14	0,46	
267	FTIR	0,250	-0,0290	-1,52	-0,33	
268	FTIR	0,205	-0,0740	-3,87	-0,83	
269	FTIR	0,220	-0,0590	-3,08	-0,66	
270	FTIR	0,330	0,0510	2,67	0,57	
271	FTIR	0,340	0,0610	3,19	0,68	
272	FTIR	0,220	-0,0590	-3,08	-0,66	
273	FTIR	0,330	0,0510	2,67	0,57	
274	FTIR	3,440	3,1610	165,27	35,48	(*)
275	FTIR	0,220	-0,0590	-3,08	-0,66	
276	FTIR	0,240	-0,0390	-2,04	-0,44	
277	FTIR	0,240	-0,0390	-2,04	-0,44	
278	FTIR	0,320	0,0410	2,14	0,46	
279	FTIR	0,300	0,0210	1,10	0,24	
280	FTIR	0,330	0,0510	2,67	0,57	
281	FTIR	0,330	0,0510	2,67	0,57	
282	FTIR	0,240	-0,0390	-2,04	-0,44	
283	FTIR	0,150	-0,1290	-6,74	-1,45	
319	FTIR	0,130	-0,1490	-7,79	-1,67	
320	FTIR	0,190	-0,0890	-4,65	-1,00	
336	FTIR	0,300	0,0210	1,10	0,24	
337	FTIR	0,240	-0,0390	-2,04	-0,44	
349	FTIR	0,250	-0,0290	-1,52	-0,33	
364	FTIR	0,140	-0,1390	-7,27	-1,56	
368	FTIR	0,105	-0,1740	-9,10	-1,95	

**5.11.3 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Destillationsverfahren**

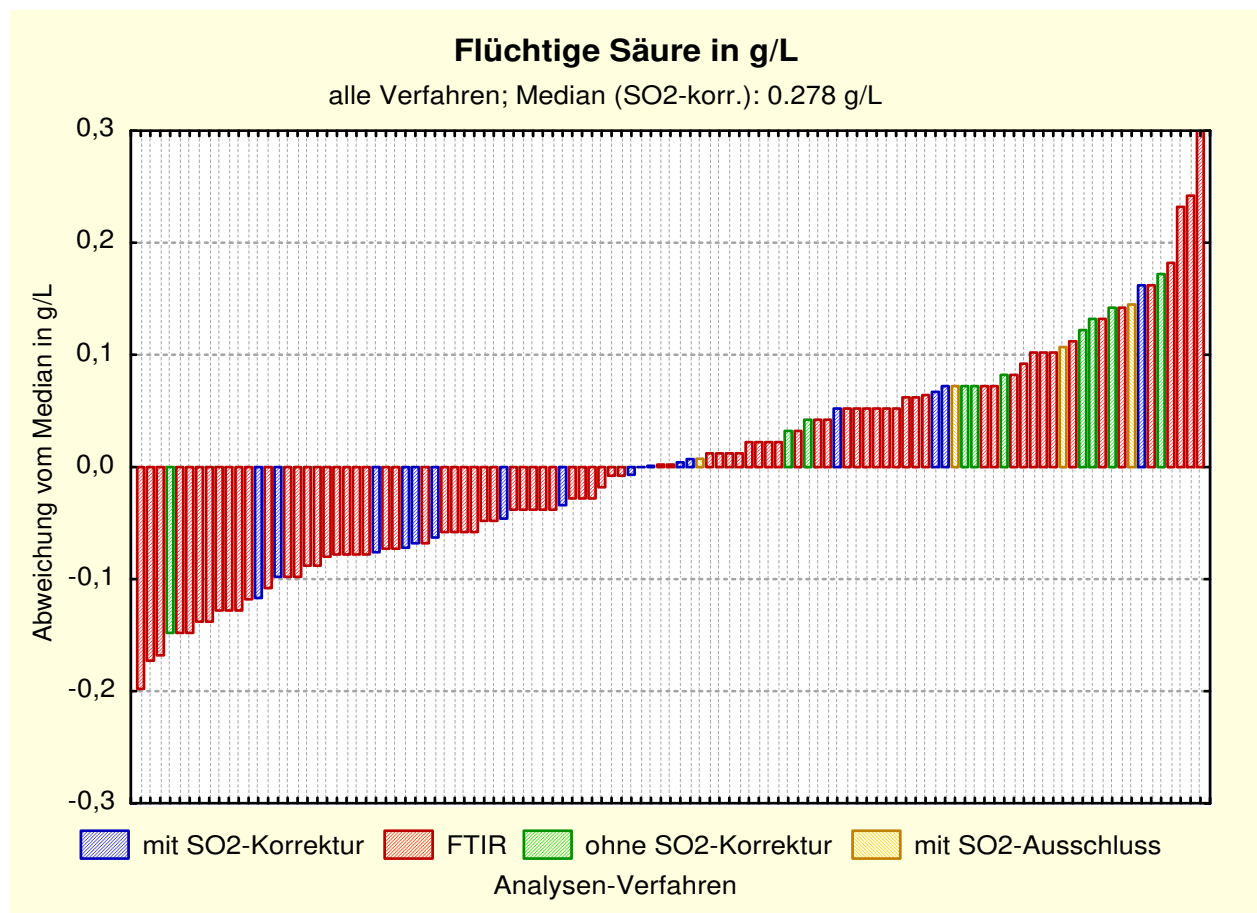
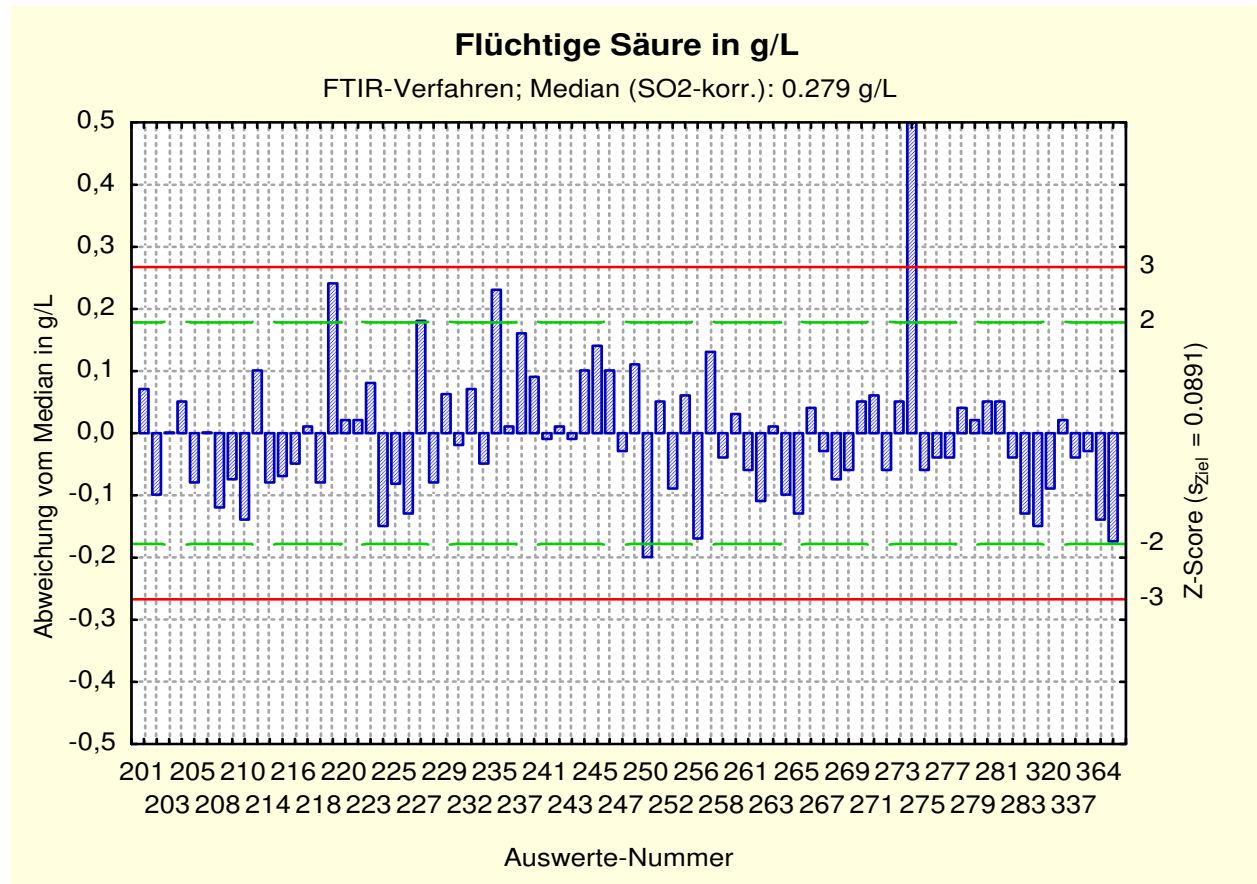
Ergebnisse für Flüchtige Säure in g/L nur Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur oder Ausschluss	alle Daten
Gültige Werte	19
Minimalwert	0,161
Mittelwert	0,2679
Median	0,2780
Maximalwert	0,385
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,064
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,015
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,019
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	0,029
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,089
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	3,35
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	2,23
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,88
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,77
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,51
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,19

**5.11.4 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Halbmikro	Halbmikrodestillation n. AVV,			
SO <sub>2</sub> unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	4	0,3800	0,0674
SO <sub>2</sub> korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	5	0,2749	0,0486
Wädenswil SO <sub>2</sub>	Wädenswil-Verfahren,			
unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss nicht berücksichtigt	3	0,3729	0,0450
korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	1	0,2320	
Gerhardt	Destillationsapparat Gerhardt,			
SO <sub>2</sub> unber.	SO <sub>2</sub> -Einfluss unberücksichtigt	1	0,4100	
SO <sub>2</sub> ausg.	SO <sub>2</sub> -Einfluss ausgeschlossen	4	0,3611	0,0659
SO <sub>2</sub> korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	7	0,2794	0,0932
OIV SO <sub>2</sub> -korr.	OIV-MA-AS-313-02			
	einschl. SO <sub>2</sub> -Korrektur	3	0,2244	0,0842
OIV o. SO <sub>2</sub> -korr.	ohne SO <sub>2</sub> -Korrektur	2	0,2250	0,1524
Rentschler mod.	Verfahren n. Rentschler mod. Dr. Nilles,			
SO <sub>2</sub> -korr.	SO <sub>2</sub> -Einfluss korrigiert	1	0,2150	
	Destillationsverfahren mit SO <sub>2</sub> -Korrektur	21	0,2811	0,0833
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	78	0,2673	0,0966







## 5.12 Acetat (als Essigsäure) [g/L]

### 5.12.1 Herkömmliche Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	enzymat. Hand	0,125	-0,045	-3,58	
06	enzymat. autom.	0,179	0,009	0,72	
07	enzymat. autom.	0,140	-0,030	-2,39	
11	enzymat. autom.	0,180	0,010	0,80	
14	enzymat. autom.	0,200	0,030	2,39	
15	enzymat. autom.	0,150	-0,020	-1,59	
22	NMR	0,120	-0,050	-3,98	
25	enzymat. autom.	0,180	0,010	0,80	
26	HPLC	0,310	0,140	11,15	(*)
29	enzymat. autom.	0,150	-0,020	-1,59	
31	enzymat. autom.	0,190	0,020	1,59	
38	enzymat. autom.	0,170	0,000	0,00	
39	HPLC	<0,3			
41	enzymat. autom.	0,155	-0,015	-1,19	
44	enzymat. autom.	0,200	0,030	2,39	
45	enzymat. autom.	0,150	-0,020	-1,59	
48	enzymat. autom.	0,180	0,010	0,80	
50	enzymat. Hand	0,112	-0,058	-4,62	
53	enzymat. autom.	0,190	0,020	1,59	
56	enzymat. autom.	0,140	-0,030	-2,39	
59	HPLC	0,283	0,113	9,00	(*)
61	enzymat. autom.	0,210	0,040	3,19	
69	enzymat. autom.	0,170	0,000	0,00	
89	NMR	0,153	-0,017	-1,35	
92	enzymat. autom.	0,170	0,000	0,00	
94	HPLC	0,110	-0,060	-4,78	
103	NMR	0,143	-0,027	-2,15	
104	NMR	0,131	-0,039	-3,09	
105	NMR	0,147	-0,023	-1,83	
106	NMR	0,124	-0,046	-3,67	
107	NMR	0,154	-0,016	-1,31	
209	FTIR	0,200	0,030	2,39	
212	FTIR	0,220	0,050	3,98	
222	FTIR	0,060	-0,110	-8,76	(**)
241	FTIR	0,110	-0,060	-4,78	
259	FTIR	0,240	0,070	5,58	(***)
260	FTIR	0,300	0,130	10,35	(**)

(\*) Diese herkömmlichen Werte weichen um mehr als 50 % vom Median ab und bleiben unberücksichtigt.

(\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der herkömmlichen Werte ab.

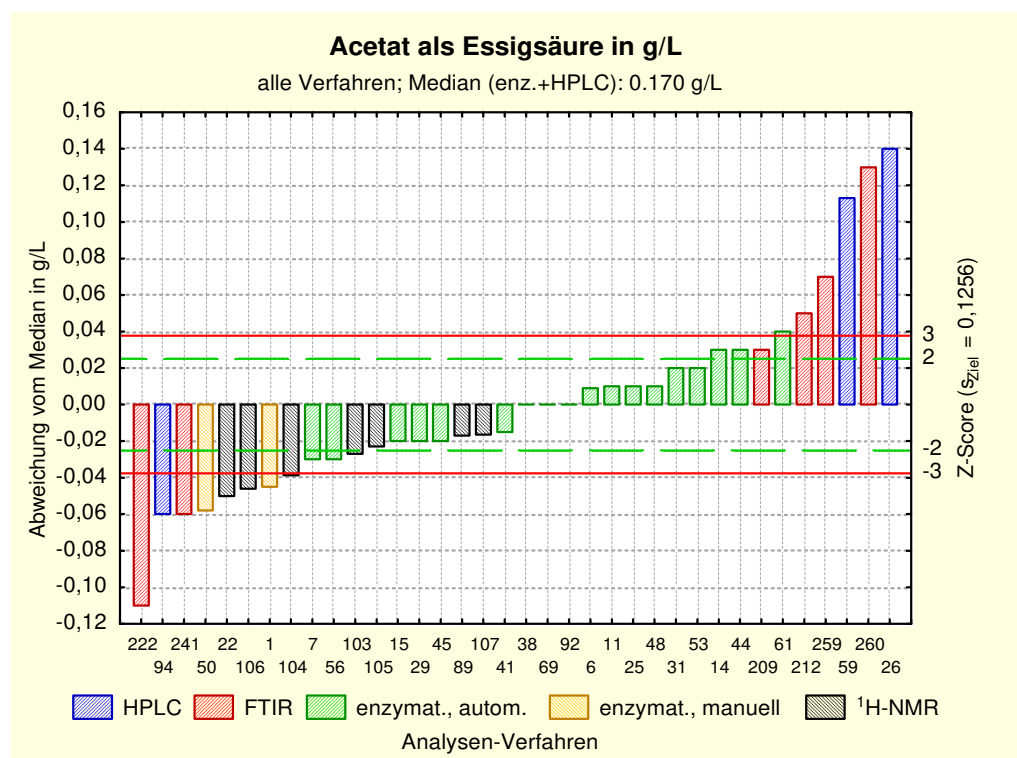
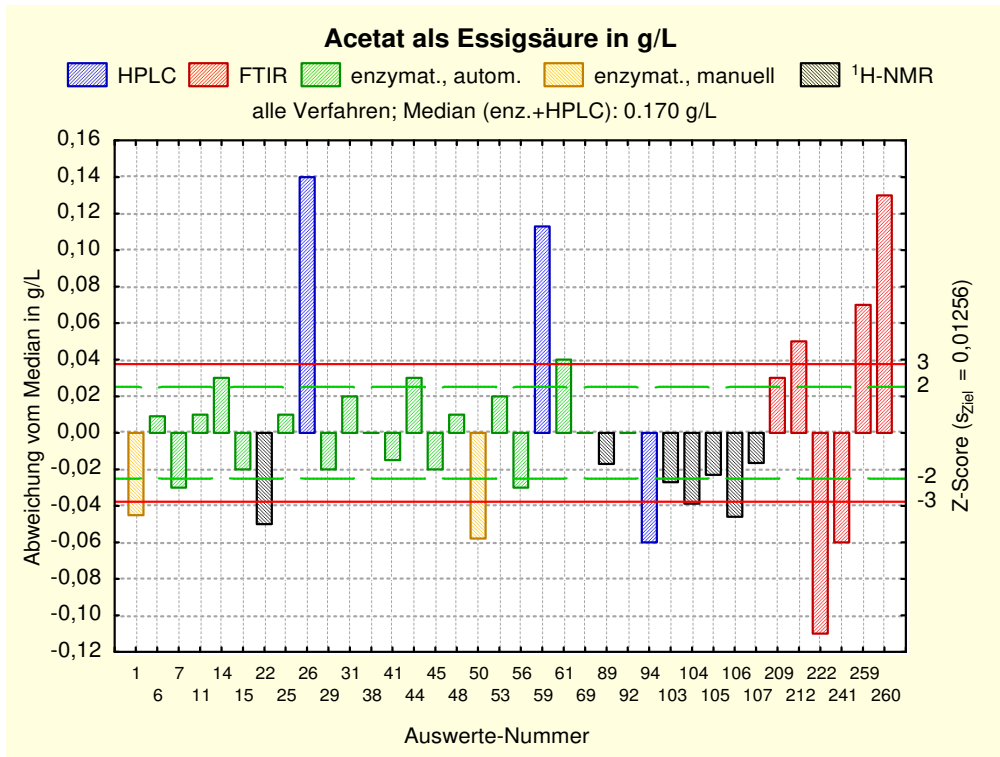
(\*\*\*) Dieser Wert weicht um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der herkömmlichen Werte ab.

### 5.12.2 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren

Ergebnisse für Acetat (als Essigsäure) [g/L]	alle Daten
Gültige Werte	21
Minimalwert	0,110
Mittelwert	0,164
Median	0,170
Maximalwert	0,210
Standardabweichung ( $s_L$ )	0,028
Standardfehler des Mittelwertes ( $u_M$ )	0,006
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	0,013
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp\ herk.}$ )	
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	
Horvat-Wert ( $s_L/s_H$ )	2,26
Quotient ( $s_L/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $s_L/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,49
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	
Quotient ( $u_M/s_{\bar{U}\ FTIR}$ )	

5.12.3 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochleistungsflüssigkeitschromatographie	3	0,2368	0,1182
enzymat. autom.	enzymatisch, automatisiert	18	0,1723	0,0239
enzymat. Hand	enzymatisch, manuell	2	0,1185	0,0104
	herkömmliche Verfahren	23	0,1700	0,0347
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	6	0,1911	0,0947
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	7	0,1388	0,0156



### 5.13 Gesamte Äpfelsäure und L-Äpfelsäure [g/L]

#### 5.13.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enzymat. Hand	1,26	-0,040	-0,57	-0,79	
02	IC	1,30	0,000	0,00	0,00	
06	HPLC	1,27	-0,030	-0,42	-0,59	
07	HPLC	1,46	0,160	2,26	3,14	
08	HPLC	1,46	0,160	2,26	3,14	
21	HPLC	1,20	-0,100	-1,41	-1,96	
22	NMR	1,42	0,120	1,70	2,36	
24	HPLC	1,30	0,000	0,00	0,00	
26	HPLC	1,26	-0,040	-0,57	-0,79	
39	HPLC	1,39	0,085	1,20	1,67	
50	HPLC	1,40	0,100	1,41	1,96	
59	HPLC	1,31	0,013	0,18	0,26	
86	enzymat. Hand	1,23	-0,070	-0,99	-1,37	
94	HPLC	1,47	0,170	2,40	3,34	
103	NMR	1,20	-0,100	-1,41	-1,96	
104	NMR	1,27	-0,030	-0,42	-0,58	
105	NMR	1,40	0,100	1,41	1,96	
106	NMR	1,20	-0,102	-1,44	-2,00	
107	NMR	1,36	0,065	0,91	1,27	

#### 5.13.2 Laborergebnisse L-Äpfelsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	enz.(L-) Hand	1,26	-0,033	-0,47	-0,65	
04	enz.(L-), autom.	1,29	0,000	0,00	0,00	
06	enz.(L-), autom.	1,30	0,010	0,14	0,20	
07	enz.(L-), autom.	1,34	0,050	0,71	0,99	
09	enz.(L-) Hand	1,29	0,000	0,00	0,00	
10	enz.(L-), autom.	1,19	-0,100	-1,42	-1,97	
11	enz.(L-), autom.	1,43	0,140	1,99	2,76	
15	enz.(L-), autom.	1,10	-0,190	-2,71	-3,75	
25	enz.(L-), autom.	1,22	-0,070	-1,00	-1,38	
29	enz.(L-), autom.	1,50	0,210	2,99	4,14	
31	enz.(L-), autom.	1,35	0,060	0,85	1,18	
38	enz.(L-), autom.	1,36	0,070	1,00	1,38	
40	enz.(L-), autom.	1,28	-0,010	-0,14	-0,20	
41	enz.(L-), autom.	1,21	-0,080	-1,14	-1,58	
42	enz.(L-), autom.	1,26	-0,030	-0,43	-0,59	
44	enz.(L-), autom.	1,28	-0,010	-0,14	-0,20	
45	enz.(L-), autom.	1,37	0,080	1,14	1,58	
48	enz.(L-), autom.	1,40	0,110	1,57	2,17	
56	enz.(L-), autom.	1,31	0,020	0,28	0,39	
59	enz.(L-), autom.	1,28	-0,010	-0,14	-0,20	
61	enz.(L-), autom.	1,57	0,280	3,99	5,53	(**)
64	enz.(L-) Hand	1,31	0,020	0,28	0,39	
69	enz.(L-), autom.	1,42	0,130	1,85	2,57	
86	enz.(L-) Hand	1,21	-0,080	-1,14	-1,58	
88	enz.(L-), autom.	1,25	-0,036	-0,51	-0,71	
92	enz.(L-), autom.	1,33	0,040	0,57	0,79	
101	enz.(L-) Hand	1,28	-0,006	-0,08	-0,12	

(\*\*) Dieser Wert blieb bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

**5.13.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Äpfelsäure**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	1,50	0,200	2,83	0,92	
202	FTIR	1,48	0,180	2,55	0,83	
203	FTIR	1,21	-0,090	-1,27	-0,41	
204	FTIR	1,41	0,110	1,56	0,50	
205	FTIR	1,16	-0,140	-1,98	-0,64	
206	FTIR	1,35	0,050	0,71	0,23	
208	FTIR	1,10	-0,200	-2,83	-0,92	
209	FTIR	1,54	0,240	3,40	1,10	
211	FTIR	1,67	0,370	5,23	1,70	
212	FTIR	1,92	0,620	8,77	2,84	
214	FTIR	2,40	1,100	15,56	5,05	(*)
215	FTIR	1,58	0,280	3,96	1,28	
216	FTIR	1,14	-0,160	-2,26	-0,73	
217	FTIR	1,77	0,470	6,65	2,16	
218	FTIR	1,68	0,380	5,38	1,74	
219	FTIR	1,60	0,300	4,24	1,38	
220	FTIR	1,46	0,160	2,26	0,73	
221	FTIR	1,42	0,120	1,70	0,55	
222	FTIR	1,37	0,070	0,99	0,32	
223	FTIR	1,50	0,200	2,83	0,92	
224	FTIR	1,07	-0,230	-3,25	-1,06	
225	FTIR	1,64	0,340	4,81	1,56	
226	FTIR	1,70	0,400	5,66	1,83	
227	FTIR	1,41	0,110	1,56	0,50	
228	FTIR	1,22	-0,080	-1,13	-0,37	
229	FTIR	1,52	0,220	3,11	1,01	
231	FTIR	1,78	0,480	6,79	2,20	
232	FTIR	1,46	0,160	2,26	0,73	
234	FTIR	1,60	0,300	4,24	1,38	
236	FTIR	1,46	0,160	2,26	0,73	
237	FTIR	1,70	0,400	5,66	1,83	
240	FTIR	1,55	0,250	3,54	1,15	
241	FTIR	1,40	0,100	1,41	0,46	
242	FTIR	1,77	0,470	6,65	2,16	
243	FTIR	1,33	0,030	0,42	0,14	
244	FTIR	1,39	0,090	1,27	0,41	
245	FTIR	1,92	0,620	8,77	2,84	
246	FTIR	1,50	0,200	2,83	0,92	
247	FTIR	1,10	-0,200	-2,83	-0,92	
249	FTIR	1,50	0,200	2,83	0,92	
250	FTIR	1,34	0,040	0,57	0,18	
252	FTIR	1,19	-0,110	-1,56	-0,50	
254	FTIR	1,60	0,300	4,24	1,38	
256	FTIR	1,79	0,490	6,93	2,25	
257	FTIR	1,67	0,370	5,23	1,70	
258	FTIR	1,47	0,170	2,40	0,78	
259	FTIR	1,26	-0,040	-0,57	-0,18	
260	FTIR	0,70	-0,600	-8,49	-2,75	
261	FTIR	1,50	0,200	2,83	0,92	
262	FTIR	1,50	0,200	2,83	0,92	
264	FTIR	0,80	-0,500	-7,07	-2,29	
265	FTIR	1,74	0,440	6,22	2,02	
266	FTIR	1,24	-0,060	-0,85	-0,28	
267	FTIR	1,81	0,510	7,21	2,34	
268	FTIR	1,60	0,300	4,24	1,38	
269	FTIR	0,99	-0,310	-4,39	-1,42	
270	FTIR	1,50	0,200	2,83	0,92	
271	FTIR	1,00	-0,300	-4,24	-1,38	
272	FTIR	2,00	0,700	9,90	3,21	
273	FTIR	1,40	0,100	1,41	0,46	
274	FTIR	1,22	-0,080	-1,13	-0,37	
275	FTIR	1,60	0,300	4,24	1,38	
276	FTIR	1,40	0,100	1,41	0,46	
277	FTIR	1,31	0,010	0,14	0,05	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der enzymatischen und HPLC-Werte ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

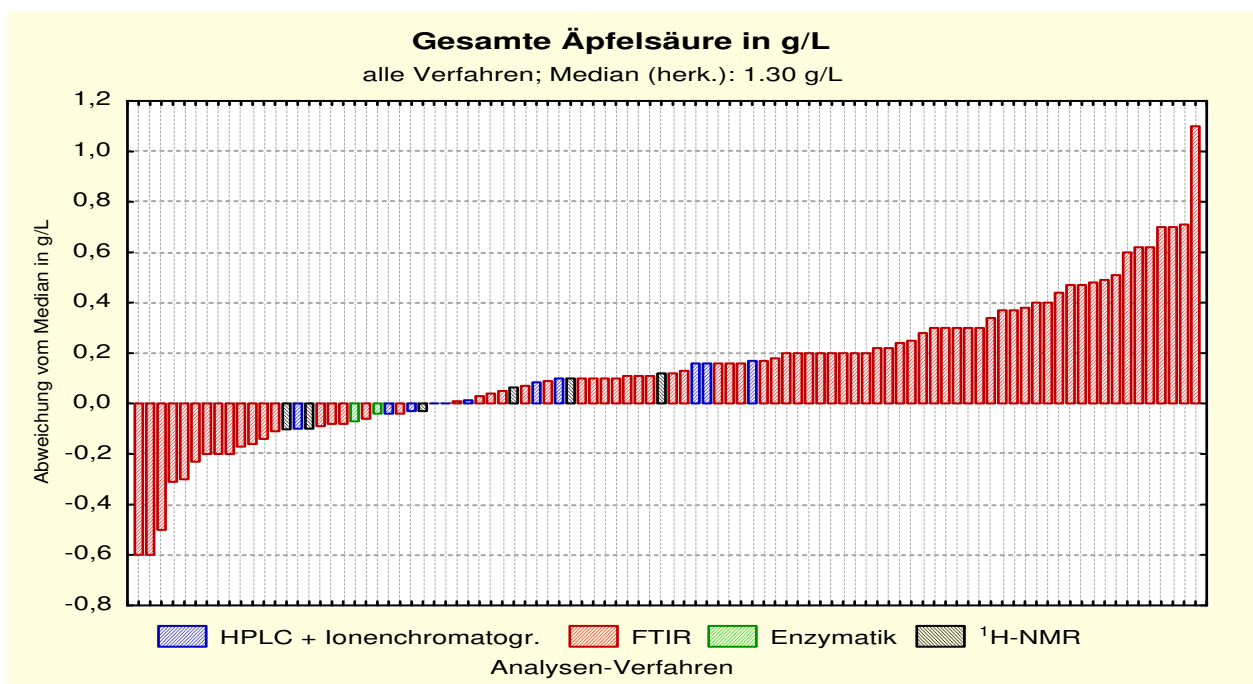
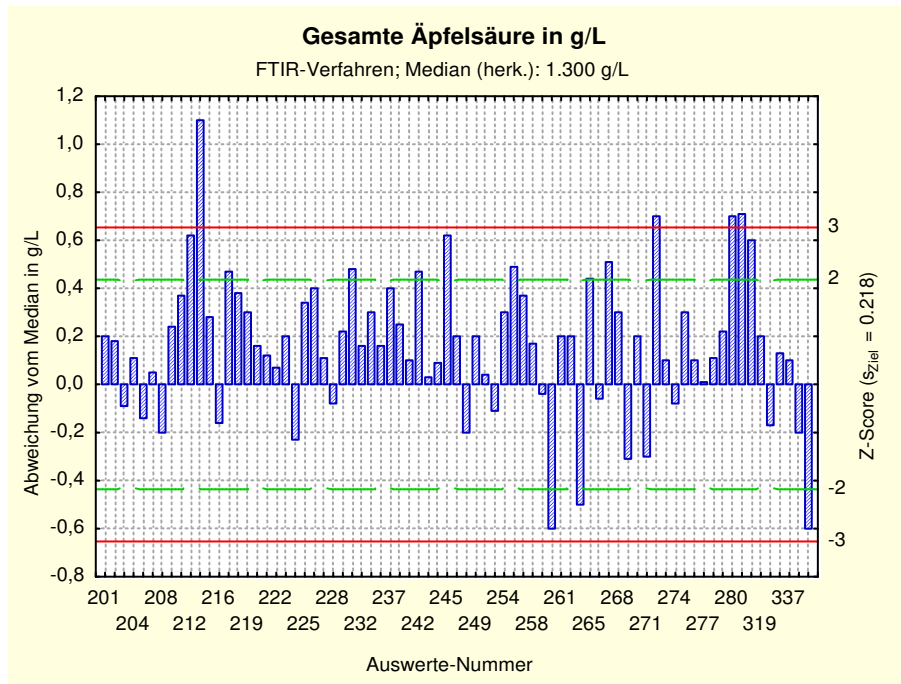
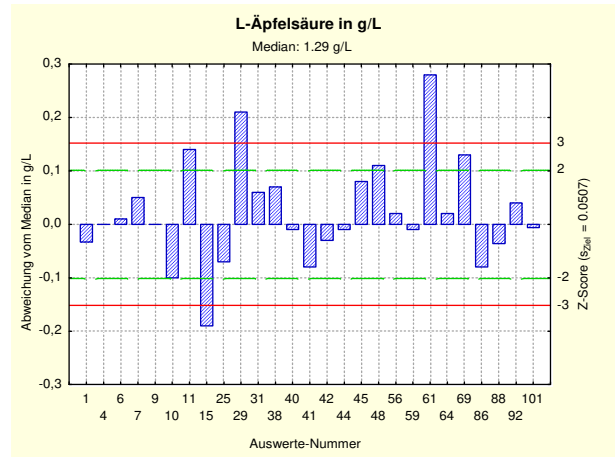
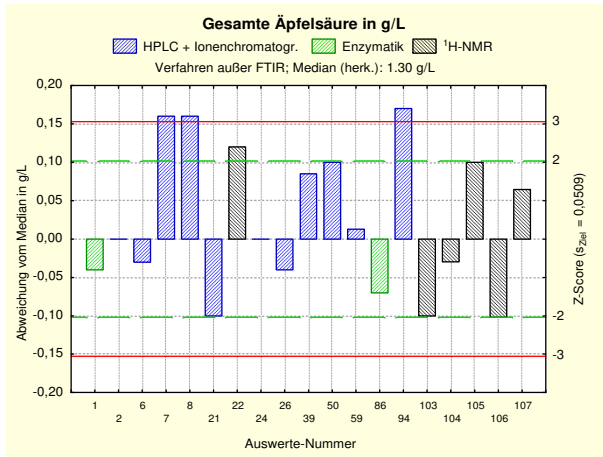
Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
278	FTIR	1,41	0,110	1,56	0,50	
279	FTIR	1,52	0,220	3,11	1,01	
280	FTIR	2,00	0,700	9,90	3,21	
282	FTIR	2,01	0,710	10,04	3,26	
283	FTIR	1,90	0,600	8,49	2,75	
319	FTIR	1,50	0,200	2,83	0,92	
320	FTIR	1,13	-0,170	-2,40	-0,78	
336	FTIR	1,43	0,130	1,84	0,60	
337	FTIR	1,40	0,100	1,41	0,46	
349	FTIR	1,10	-0,200	-2,83	-0,92	
364	FTIR	0,70	-0,600	-8,49	-2,75	

**5.13.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse [g/L]	Gesamte Äpfelsäure		L-Äpfelsäure	
	alle Daten	alle Daten	ber. Daten	
Gültige Werte	13	27	26	
Minimalwert	1,20	1,10	1,10	
Mittelwert	1,331	1,311	1,301	
Median	1,300	1,290	1,290	
Maximalwert	1,47	1,57	1,50	
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,093	0,097	0,084	
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,026	0,019	0,016	
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,071	0,070	0,070	
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )	0,051	0,051	0,051	
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,218			
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,31	1,39	1,20	
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )	1,83	1,92	1,66	
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,43			
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,36	0,27	0,23	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,51	0,37	0,33	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	0,12			

**5.13.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufig- keit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	10	1,352	0,109
IC	Ionenchromatographie	1	1,300	
enzymat. Hand	D- und L-Äpfelsäure, enzymatisch manuell	2	1,245	0,024
	herkömmliche Verfahren Gesamte Äpfelsäure	13	1,330	0,102
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	75	1,469	0,273
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	6	1,309	0,113
enz.(L-), autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	22	1,316	0,0938
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form, manuell	5	1,271	0,0430
	alle Verfahren L-Äpfelsäure	27	1,306	0,0846



## 5.14 Gesamte Milchsäure und L-Milchsäure [g/L]

### 5.14.1 Herkömmliche Laborergebnisse Gesamte Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
03	enzymat. Hand	0,215	0,013	0,93	
06	enzymat. autom.	0,210	0,008	0,59	
07	HPLC	0,171	-0,030	-2,10	
08	enzymat. Hand	0,210	0,008	0,59	
09	enzymat. Hand	0,220	0,018	1,28	
10	enzymat. autom.	0,176	-0,026	-1,76	
21	HPLC	0,100	-0,102	-7,00	(**)
22	NMR	0,190	-0,012	-0,79	
24	HPLC	0,100	-0,102	-7,00	(**)
26	HPLC	<= 0			
39	HPLC	<0,2			
50	HPLC	0,050	-0,152	-10,44	(*)
59	HPLC	0,196	-0,006	-0,38	
64	enzymat. Hand	0,218	0,016	1,14	
69	enzymat. autom.	0,130	-0,072	-4,93	
86	enzymat. Hand	0,207	0,005	0,38	
88	enzymat. autom.	0,209	0,007	0,52	
92	enzymat. autom.	0,170	-0,032	-2,17	
94	HPLC	0,160	-0,042	-2,86	
101	enzymat. Hand	0,184	-0,017	-1,17	
103	NMR	<0,2			
104	NMR	<0,2			
105	NMR	<0,2			
106	NMR	<0,2			
107	NMR	0,207	0,006	0,41	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und bleibt bei Berechnungen unberücksichtigt.

(\*\*) Diese Werte blieben bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

### 5.14.2 Laborergebnisse L-Milchsäure

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
03	enz.(L-) Hand	0,060	0,001	0,10	0,02	
04	enz.(L-) autom.	0,020	-0,040	-7,72	-1,97	
06	enz.(L-) autom.	0,060	0,000	0,00	0,00	
09	enz.(L-) Hand	0,070	0,010	1,93	0,49	
10	enz.(L-) autom.	0,053	-0,007	-1,35	-0,35	
11	enz.(L-) autom.	0,120	0,060	11,57	2,96	
15	enz.(L-) autom.	<= 0				
25	enz.(L-) autom.	0,050	-0,010	-1,93	-0,49	
29	enz.(L-) autom.	0,100	0,040	7,72	1,97	
31	enz.(L-) autom.	<= 0				
38	enz.(L-) autom.	<= 0				
40	enz.(L-) autom.	0,270	0,210	40,51	10,36	(*)
41	enz.(L-) autom.	0,060	0,000	0,00	0,00	
42	enz.(L-) autom.	<= 0				
44	enz.(L-) autom.	<0,2				
45	enz.(L-) autom.	0,060	0,000	0,00	0,00	
48	enz.(L-) autom.	<= 0				
56	enz.(L-) autom.	0,060	0,000	0,00	0,00	
59	enz.(L-) autom.	0,065	0,005	0,96	0,25	
61	enz.(L-) autom.	0,100	0,040	7,72	1,97	
64	enz.(L-) Hand	0,068	0,008	1,45	0,37	
69	enz.(L-) autom.	0,016	-0,044	-8,50	-2,17	
86	enz.(L-) Hand	0,148	0,088	16,98	4,34	
88	enz.(L-) autom.	0,070	0,010	1,93	0,49	
92	enz.(L-) autom.	0,050	-0,010	-1,93	-0,49	
101	enz.(L-) Hand	0,056	-0,004	-0,72	-0,18	

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median ab und bleibt bei Berechnungen unberücksichtigt.



**5.14.3 FTIR-Laborergebnisse Gesamte Milchsäure****Keine Berechnung von Z-Score, da Gehalt geringer als untere Grenze des Anwendungsbereichs.**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
201	FTIR	0,420	0,218			(*)
202	FTIR	0,210	0,008			
203	FTIR	0,120	-0,082			
204	FTIR	0,073	-0,129			(*)
205	FTIR	0,090	-0,112			(*)
206	FTIR	0,270	0,069			
208	FTIR	0,200	-0,002			
209	FTIR	0,020	-0,182			(*)
211	FTIR	0,270	0,069			
212	FTIR	0,690	0,488			(*)
214	FTIR	0,300	0,098			(*)
215	FTIR	0,330	0,129			(*)
216	FTIR	<= 0				
217	FTIR	0,370	0,168			(*)
218	FTIR	0,340	0,139			(*)
219	FTIR	<= 0				
220	FTIR	0,540	0,339			(*)
221	FTIR	0,500	0,298			(*)
222	FTIR	0,310	0,108			(*)
223	FTIR	0,100	-0,102			
224	FTIR	0,280	0,079			(*)
225	FTIR	0,490	0,288			(*)
226	FTIR	0,300	0,098			(*)
227	FTIR	-0,020	-0,222			(*)
228	FTIR	0,230	0,028			
229	FTIR	0,410	0,208			(*)
231	FTIR	0,350	0,148			(*)
232	FTIR	0,130	-0,072			
234	FTIR	0,310	0,108			(*)
236	FTIR	0,190	-0,012			
237	FTIR	<= 0				
240	FTIR	0,190	-0,012			
241	FTIR	<= 0				
242	FTIR	0,720	0,518			(*)
243	FTIR	0,030	-0,172			(*)
244	FTIR	0,540	0,339			(*)
245	FTIR	0,330	0,129			(*)
246	FTIR	0,200	-0,002			
247	FTIR	0,400	0,199			(*)
249	FTIR	0,200	-0,002			
250	FTIR	0,680	0,479			(*)
252	FTIR	0,210	0,008			
254	FTIR	0,100	-0,102			
256	FTIR	0,540	0,339			(*)
257	FTIR	0,140	-0,061			
258	FTIR	0,150	-0,052			
259	FTIR	0,200	-0,002			
260	FTIR	0,100	-0,102			
261	FTIR	0,400	0,199			(*)
262	FTIR	<= 0				
264	FTIR	<= 0				
265	FTIR	0,640	0,439			(*)
266	FTIR	0,560	0,359			(*)
267	FTIR	0,190	-0,012			
268	FTIR	0,450	0,249			(*)
269	FTIR	<= 0				
270	FTIR	0,400	0,199			(*)
271	FTIR	0,520	0,319			(*)
272	FTIR	0,600	0,398			(*)
273	FTIR	0,260	0,058			
274	FTIR	0,830	0,628			(*)
275	FTIR	0,300	0,098			(*)

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Werte herkömmlicher Methoden ab.

**Fortsetzung: FTIR-Laborergebnisse**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
276	FTIR	0,100	-0,102			
277	FTIR	0,200	-0,002			
278	FTIR	0,090	-0,112			(*)
279	FTIR	0,200	-0,002			
280	FTIR	0,700	0,498			(*)
282	FTIR	0,330	0,129			(*)
283	FTIR	0,200	-0,002			
319	FTIR	<= 0				
320	FTIR	0,540	0,339			(*)
336	FTIR	0,190	-0,012			
337	FTIR	0,200	-0,002			
349	FTIR	0,400	0,199			(*)
364	FTIR	<= 0				

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Werte herkömmlicher Methoden ab.

**Allgemeine Anmerkungen** zu allen Laborergebnissen für diesen Parameter

Werte unter der Bestimmungsgrenze können nicht durch Z-Score bewertet werden.

<= 0: nicht normgerechte Angabe "0" vom Auswerter ersetzt.

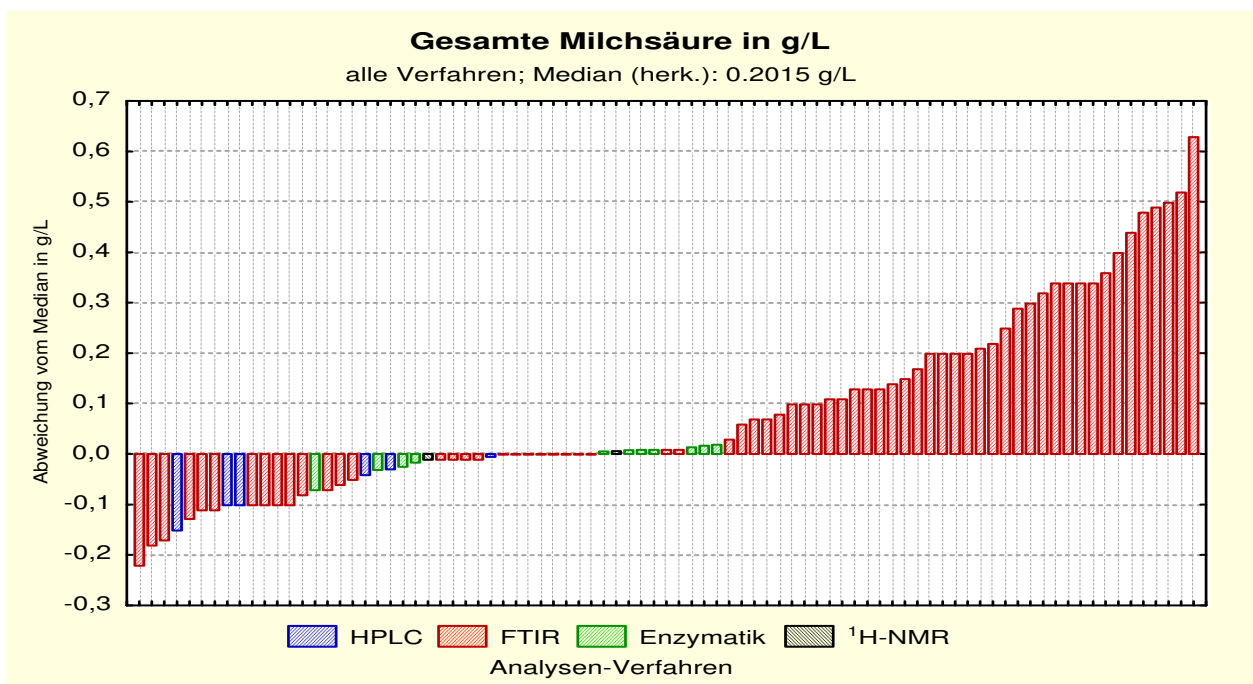
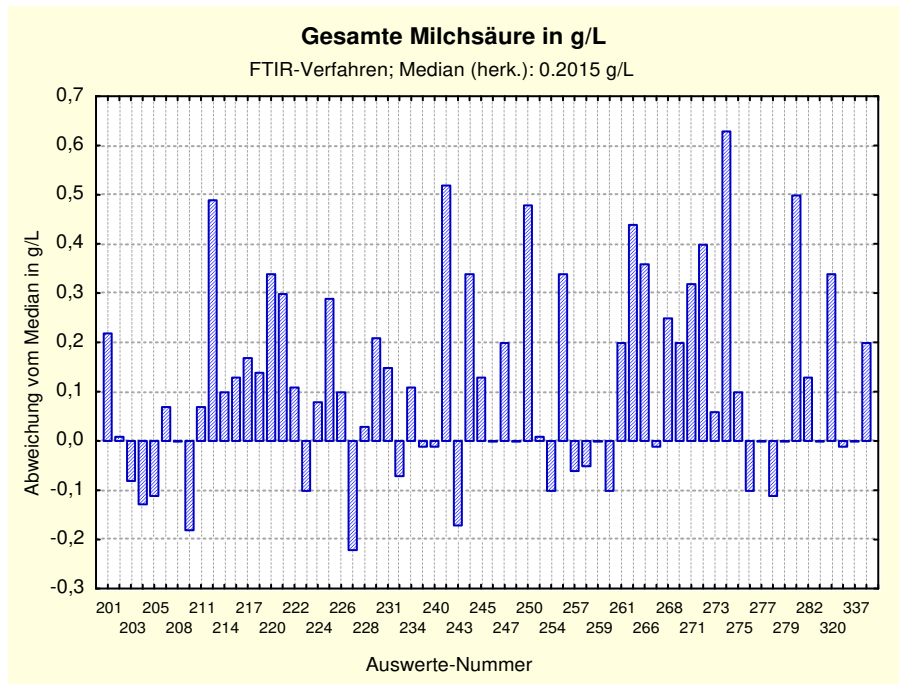
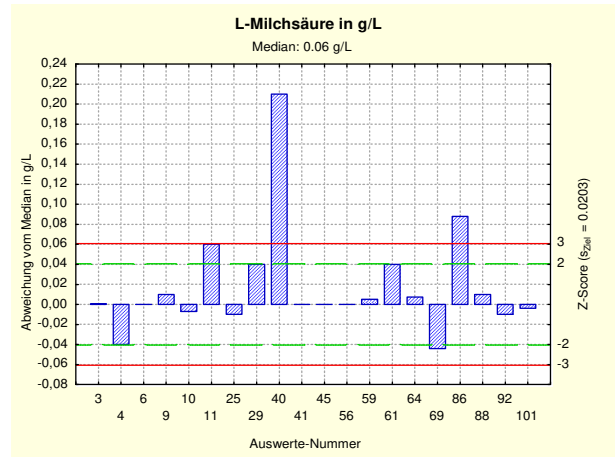
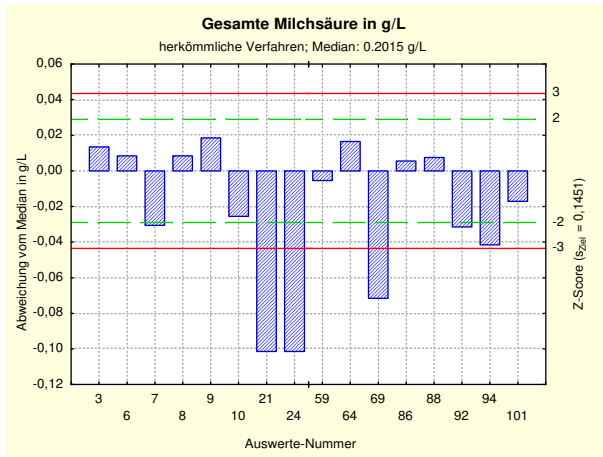
Korrekte Form bei Werten unter der Bestimmungs- oder Nachweisgrenze: < BG (< Wert der Grenze) oder < NG (< Wert der Grenze)

**5.14.4 Deskriptive Ergebnisse der herkömmlichen Verfahren**

Ergebnisse in g/L:	Gesamte Milchsäure		L- Milchsäure
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	16	14	19
Minimalwert	0,10	0,13	0,02
Mittelwert	0,180	0,191	0,068
Median	0,190	0,202	0,060
Maximalwert	0,22	0,22	0,15
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	0,040	0,027	0,031
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	0,010	0,007	0,007
Zielstandardabweichung n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	0,014	0,015	0,005
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>exp</sub> )			0,020
Zielstandardabweichung, experimentell (s <sub>Ü FTIR</sub> )	(0,209)	(0,209)	
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	2,88	1,84	6,02
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp</sub> )			1,54
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	(0,19)	(0,13)	
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,72	0,49	1,38
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )			0,35
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>Ü FTIR</sub> )	(0,05)	(0,03)	

**5.14.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Häufigkeit	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
HPLC	Hochdruckflüssigkeitschromatographie	6	0,1297	0,0621
enzymat. autom.	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, automatisiert	5	0,1790	0,0374
enzymat. Hand	D- und L-Milchsäure, enzymatisch, manuell	6	0,2110	0,0099
	herkömmliche Verfahren Ges. Milchsäure	17	0,1762	0,0466
FTIR	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie	66	0,3056	0,1938
NMR	<sup>1</sup> H-Kernresonanzspektroskopie	2	0,1987	0,0140
enz.(L-) autom.	enzymatisch nur L-Form, automatisiert	15	0,0655	0,0326
enz.(L-) Hand	enzymatisch nur L-Form	5	0,0710	0,0198
	alle Verfahren L-Milchsäure	20	0,0684	0,0305



## 5.15 Reduktone [mg/L]

### 5.15.1 Laborergebnisse

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	Glyoxal/Stärke	12,0	-9,00	-4,24	
06	Acetaldehyd/potent.	22,0	1,00	0,47	
14	Glyoxal/potentiometr.	20,0	-1,00	-0,47	
15	Glyoxal/Stärke	20,0	-1,00	-0,47	
17	Glyoxal/Stärke	23,0	2,00	0,94	
18	Glyoxal/potentiometr.	17,6	-3,40	-1,60	
19	Glyoxal/Stärke	21,0	0,00	0,00	
20	Glyoxal/Stärke	22,0	1,00	0,47	
21	Glyoxal/potentiometr.	31,0	10,00	4,71	
22	Glyoxal/Stärke	24,0	3,00	1,41	
23	Glyoxal/Stärke	13,0	-8,00	-3,76	
24	Glyoxal/Stärke	10,0	-11,00	-5,18	(*)
25	Glyoxal/potentiometr.	25,1	4,10	1,93	
26	Propionaldehyd/Stärke	21,0	0,00	0,00	
28	Glyoxal/Stärke	22,0	1,00	0,47	
29	Glyoxal/Stärke	20,0	-1,00	-0,47	
30	Glyoxal/potentiometr.	18,0	-3,00	-1,41	
31	Glyoxal/Stärke	23,0	2,00	0,94	
32	Propionaldehyd/Stärke	33,0	12,00	5,65	(*)
34	Glyoxal/Stärke	18,0	-3,00	-1,41	
36	Glyoxal/Stärke	26,0	5,00	2,35	
37	Glyoxal/Stärke	22,0	1,00	0,47	
38	Glyoxal/Stärke	22,0	1,00	0,47	
39	Glyoxal/potentiometr.	23,3	2,30	1,08	
40	Glyoxal/Stärke	18,0	-3,00	-1,41	
41	Glyoxal/Stärke	21,0	0,00	0,00	
42	Glyoxal/Stärke	15,0	-6,00	-2,82	
45	Glyoxal/potentiometr.	20,3	-0,70	-0,33	
46	Glyoxal/Stärke	19,0	-2,00	-0,94	
48	Glyoxal/Stärke	25,0	4,00	1,88	
49	Glyoxal/Stärke	18,0	-3,00	-1,41	
50	Glyoxal/potentiometr.	18,0	-3,00	-1,41	
54	Glyoxal/Stärke	10,0	-11,00	-5,18	(*)
56	Glyoxal/MTT	16,6	-4,40	-2,07	
59	Acetaldehyd/potent.	22,3	1,30	0,61	
60	Glyoxal/potentiometr.	23,0	2,00	0,94	
61	Glyoxal/Stärke	18,0	-3,00	-1,41	
62	Glyoxal/Stärke	20,0	-1,00	-0,47	
64	Glyoxal/Stärke	20,0	-1,00	-0,47	
66	Glyoxal/potentiometr.	19,0	-2,00	-0,94	
68	Glyoxal/potentiometr.	25,0	4,00	1,88	
69	Glyoxal/potentiometr.	23,0	2,02	0,95	
72	Glyoxal/potentiometr.	26,0	5,00	2,35	
77	Propionaldehyd/Stärke	22,0	1,00	0,47	
78	Glyoxal/potentiometr.	23,0	2,00	0,94	
80	Glyoxal/potentiometr.	16,0	-5,00	-2,35	
83	Glyoxal/potentiometr.	36,0	15,00	7,06	(*)
94	Glyoxal/potentiometr.	22,2	1,17	0,55	
101	Glyoxal/Stärke	21,0	0,00	0,00	

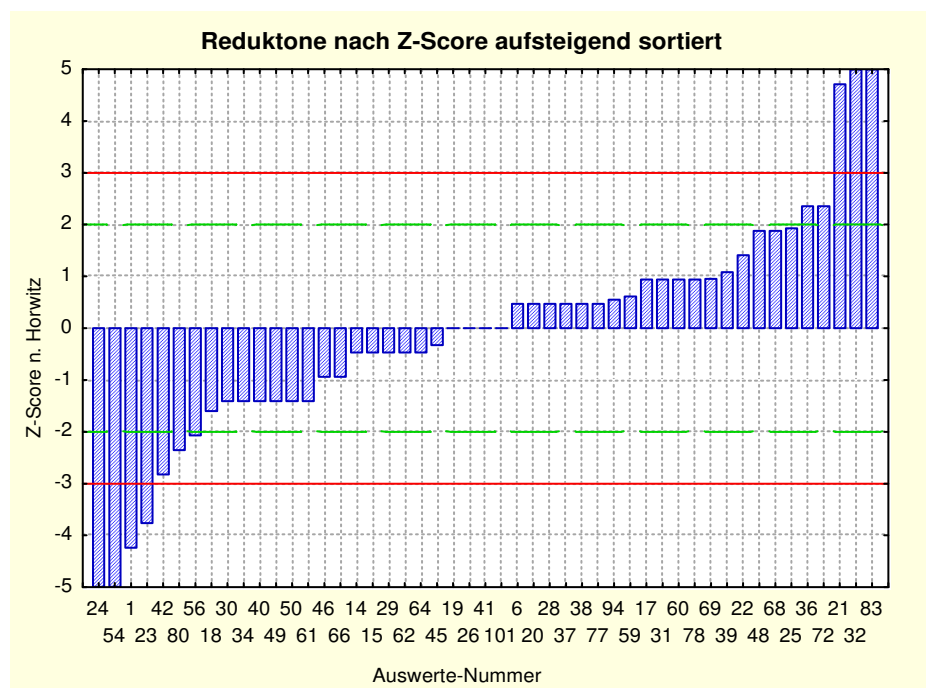
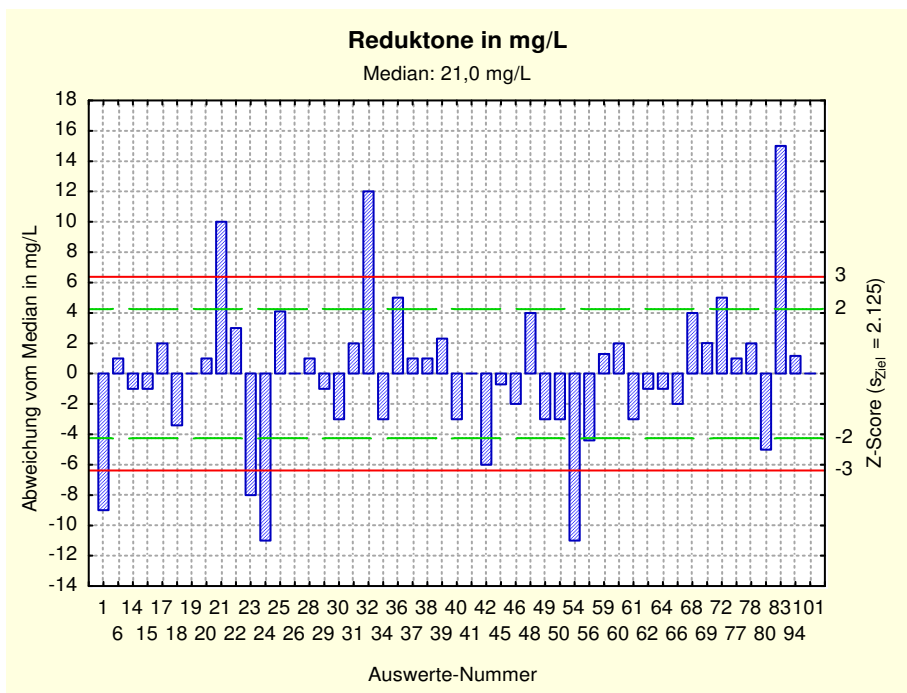
(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Werte ab und bleiben unberücksichtigt.

### 5.15.2 Angaben zu den Analyseverfahren

Verfahren-Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
Acetaldehyd/potent.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Acetaldehyd; Platinelektrode	2	22,15	0,24
Propionaldehyd/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Propionaldehyd; Stärke als Indikator	3	24,43	5,78
Glyoxal/Stärke	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Stärke als Indikator	26	19,73	3,92
Glyoxal/potentiometr.	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; Platinelektrode	17	22,17	4,24
Glyoxal/MTT	SO <sub>2</sub> -Bindung mit Glyoxal; automat. phot. mit MTT	1	16,60	
	alle Verfahren	49	20,87	3,67

5.15.3 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Reduktone [mg/L]	alle Daten
Gültige Werte	45
Minimalwert	12,0
Mittelwert	20,83
Median	21,00
Maximalwert	31,0
Standardabweichung ( $s_L$ )	3,521
Standardfehler des Mittelwertes	0,525
Zielstandardabweichung n. Horwitz ( $s_H$ )	2,125
Zielstandardabweichung, experimentell ( $s_{exp}$ )	
Horrat-Wert ( $s_L/s_H$ )	1,66
Quotient ( $s_L/s_{exp}$ )	
Quotient ( $u_M/s_H$ )	0,25
Quotient ( $u_M/s_{exp\ herk.}$ )	



## 5.16 Freie Schweflige Säure [mg/L]

### 5.16.1 Laborergebnisse mit Destillations-, photometrischen Verfahren und FTIR

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillations- und photometrischen Verfahren

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
05	LwK 6.3	19,0	2,00	1,13	
06	LwK 6.2	17,7	0,70	0,39	
07	LwK 6.2	16,3	-0,68	-0,38	
09	LwK 6.2	14,2	-2,80	-1,58	
10	LwK 6.2	19,5	2,52	1,42	
11	LwK 6.3	14,0	-3,00	-1,69	
27	LwK 6.2	15,9	-1,10	-0,62	
44	LwK 6.3	18,0	1,00	0,56	
48	LwK 6.3	16,0	-1,00	-0,56	
53	LwK 6.3	17,0	0,00	0,00	
55	LwK 6.4	17,0	0,00	0,00	
56	LwK 6.4	14,6	-2,40	-1,35	
88	LwK 6.2	22,0	5,00	2,82	
92	LwK 6.2	17,6	0,60	0,34	
100	LwK 6.2	16,1	-0,90	-0,51	
206	LwK 6.5	18,0	1,00	0,56	
207	LwK 6.5	21,6	4,60	2,59	
209	LwK 6.5	20,1	3,10	1,75	
210	LwK 6.5	22,5	5,50	3,10	
211	LwK 6.5	23,0	6,00	3,38	
218	LwK 6.5	21,5	4,50	2,53	
224	LwK 6.5	23,0	6,00	3,38	
237	LwK 6.5	22,0	5,00	2,82	
251	LwK 6.5	31,0	14,00	7,88	(*)
252	LwK 6.5	28,0	11,00	6,19	(*)
258	LwK 6.5	32,3	15,30	8,62	(*)
262	LwK 6.5	21,0	4,00	2,25	
263	LwK 6.5	21,0	4,00	2,25	
270	LwK 6.5	20,0	3,00	1,69	
319	LwK 6.5	24,0	7,00	3,94	
336	LwK 6.5	26,0	9,00	5,07	(*)
337	LwK 6.5	22,0	5,00	2,82	
364	LwK 6.5	38,0	21,00	11,83	(*)

(\*) Diese Werte weichen um mehr als 50 % vom Median der Werte aus Destillation und Photometrie ab.

### 5.16.2 Laborergebnisse, jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
01	LwK 6.1 (incl.Red.)	32,0	-6,00	-1,71	
14	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	0,00	0,00	
15	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	0,00	0,00	
17	LwK 6.1 (incl.Red.)	35,0	-3,00	-0,85	
18	LwK 6.1 (incl.Red.)	37,3	-0,70	-0,20	
19	LwK 6.1 (incl.Red.)	38,0	0,00	0,00	
20	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	1,00	0,28	
21	LwK 6.1 (incl.Red.)	46,0	8,00	2,27	
22	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	2,00	0,57	
23	LwK 6.1 (incl.Red.)	36,0	-2,00	-0,57	
24	LwK 6.1 (incl.Red.)	32,0	-6,00	-1,71	
25	LwK 6.1 (incl.Red.)	42,7	4,71	1,34	
26	LwK 6.1 (incl.Red.)	30,0	-8,00	-2,27	
28	LwK 6.1 (incl.Red.)	39,0	1,00	0,28	
29	LwK 6.1 (incl.Red.)	35,0	-3,00	-0,85	
30	LwK 6.1 (incl.Red.)	41,0	3,00	0,85	
31	LwK 6.1 (incl.Red.)	40,0	2,00	0,57	
32	LwK 6.1 (incl.Red.)	42,0	4,00	1,14	
34	LwK 6.1 (incl.Red.)	31,0	-7,00	-1,99	
36	LwK 6.1 (incl.Red.)	41,0	3,00	0,85	

**Fortsetzung: Laborergebnisse, jodometrisch einschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Hinweis
37	LwK 6.1(incl.Red.)	41,0	3,00	0,85	
38	LwK 6.1(incl.Red.)	39,0	1,00	0,28	
39	LwK 6.1(incl.Red.)	44,2	6,20	1,76	
40	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	-2,00	-0,57	
41	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	2,00	0,57	
42	LwK 6.1(incl.Red.)	33,0	-5,00	-1,42	
45	LwK 6.1(incl.Red.)	36,7	-1,30	-0,37	
46	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	0,00	0,00	
49	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	-2,00	-0,57	
50	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	-2,00	-0,57	
52	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	-4,00	-1,14	
54	LwK 6.1(incl.Red.)	20,0	-18,00	-5,12	(**)
59	LwK 6.1(incl.Red.)	37,3	-0,70	-0,20	
60	LwK 6.1(incl.Red.)	43,0	5,00	1,42	
61	LwK 6.1(incl.Red.)	34,0	-4,00	-1,14	
62	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	-2,00	-0,57	
64	LwK 6.1(incl.Red.)	38,0	0,00	0,00	
66	LwK 6.1(incl.Red.)	36,0	-2,00	-0,57	
68	LwK 6.1(incl.Red.)	45,0	7,00	1,99	
69	LwK 6.1(incl.Red.)	39,1	1,06	0,30	
72	LwK 6.1(incl.Red.)	40,0	2,00	0,57	
77	LwK 6.1(incl.Red.)	33,0	-5,00	-1,42	
78	Redox(incl.Red.)	34,0	-4,00	-1,14	
80	LwK 6.1(incl.Red.)	28,0	-10,00	-2,84	
83	LwK 6.1(incl.Red.)	43,0	5,00	1,42	
101	LwK 6.1(incl.Red.)	39,0	1,00	0,28	

(\*\*) Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt.

**5.16.3 Laborergebnisse, jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone.

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score S <sub>H</sub> incl. Red.	Hinweis
01	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	3,00	1,69	0,85	
14	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	1,00	0,56	0,28	
15	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	1,00	0,56	0,28	
17	LwK 6.1(excl.Red.)	12,0	-5,00	-2,82	-1,42	
18	LwK 6.1(excl.Red.)	19,7	2,70	1,52	0,77	
19	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	0,00	0,00	0,00	
20	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	0,00	0,00	0,00	
21	LwK 6.1(excl.Red.)	15,0	-2,00	-1,13	-0,57	
22	LwK 6.1(excl.Red.)	16,0	-1,00	-0,56	-0,28	
23	LwK 6.1(excl.Red.)	23,0	6,00	3,38	1,71	
24	LwK 6.1(excl.Red.)	22,0	5,00	2,82	1,42	
25	LwK 6.1(excl.Red.)	17,6	0,61	0,34	0,17	
26	LwK 6.1(excl.Red.)	9,0	-8,00	-4,51	-2,27	
28	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	0,00	0,00	0,00	
29	LwK 6.1(excl.Red.)	15,0	-2,00	-1,13	-0,57	
30	LwK 6.1(excl.Red.)	23,0	6,00	3,38	1,71	
31	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	0,00	0,00	0,00	
32	LwK 6.1(excl.Red.)	9,0	-8,00	-4,51	-2,27	
34	LwK 6.1(excl.Red.)	13,0	-4,00	-2,25	-1,14	
36	LwK 6.1(excl.Red.)	15,0	-2,00	-1,13	-0,57	
37	LwK 6.1(excl.Red.)	19,0	2,00	1,13	0,57	
38	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	0,00	0,00	0,00	
39	LwK 6.1(excl.Red.)	20,9	3,90	2,20	1,11	
40	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	1,00	0,56	0,28	
41	LwK 6.1(excl.Red.)	19,0	2,00	1,13	0,57	
42	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	1,00	0,56	0,28	
45	LwK 6.1(excl.Red.)	16,4	-0,60	-0,34	-0,17	
46	LwK 6.1(excl.Red.)	19,0	2,00	1,13	0,57	
49	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	1,00	0,56	0,28	
50	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	1,00	0,56	0,28	
54	LwK 6.1(excl.Red.)	10,0	-7,00	-3,94	-1,99	

**Fortsetzung: Laborergebnisse, jodometrisch ausschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score S <sub>H</sub> incl. Red.	Hinweis
59	LwK 6.1(excl.Red.)	15,0	-2,00	-1,13	-0,57	
60	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	3,00	1,69	0,85	
61	LwK 6.1(excl.Red.)	16,0	-1,00	-0,56	-0,28	
62	LwK 6.1(excl.Red.)	16,0	-1,00	-0,56	-0,28	
64	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	1,00	0,56	0,28	
66	LwK 6.1(excl.Red.)	17,0	0,00	0,00	0,00	
68	LwK 6.1(excl.Red.)	20,0	3,00	1,69	0,85	
69	LwK 6.1(excl.Red.)	16,0	-0,96	-0,54	-0,27	
72	LwK 6.1(excl.Red.)	14,0	-3,00	-1,69	-0,85	
77	LwK 6.1(excl.Red.)	11,0	-6,00	-3,38	-1,71	
78	Redox(excl.Red.)	11,0	-6,00	-3,38	-1,71	
80	LwK 6.1(excl.Red.)	12,0	-5,00	-2,82	-1,42	
83	LwK 6.1(excl.Red.)	7,0	-10,00	-5,63	-2,84	
101	LwK 6.1(excl.Red.)	18,0	1,00	0,56	0,28	

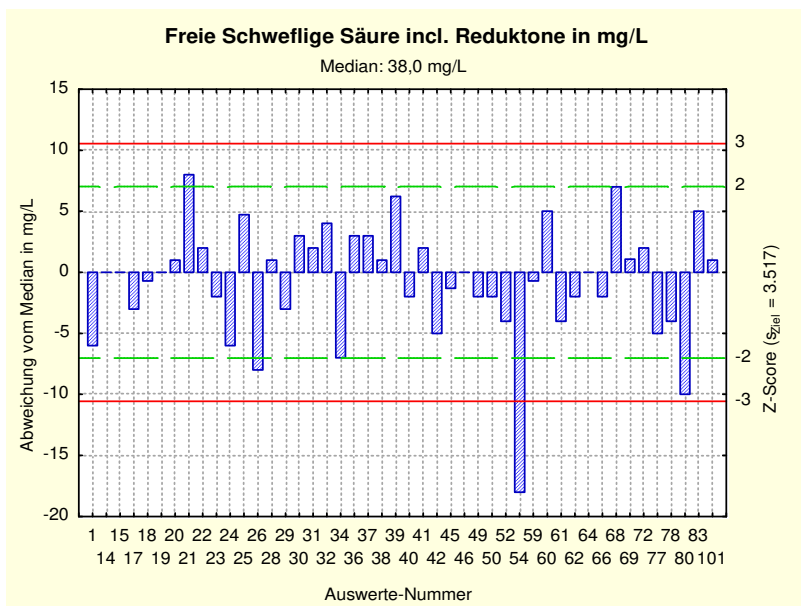
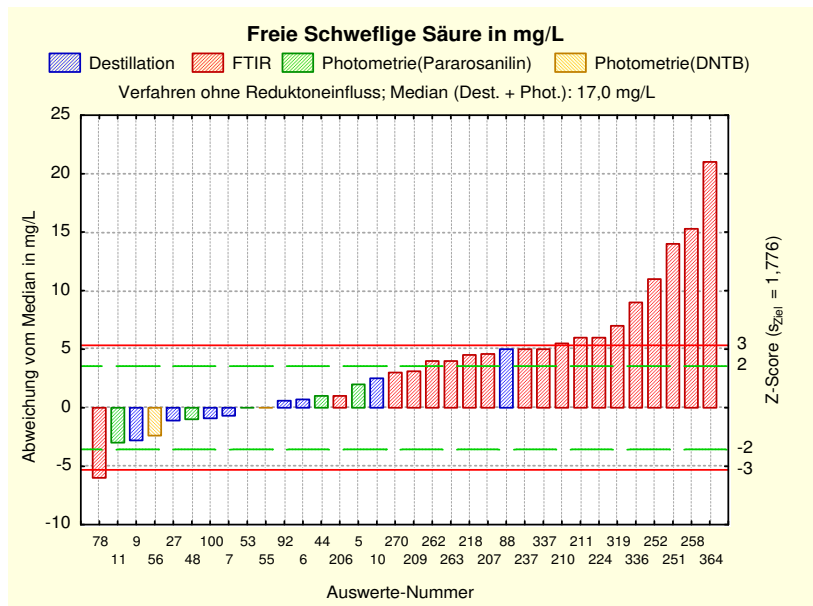
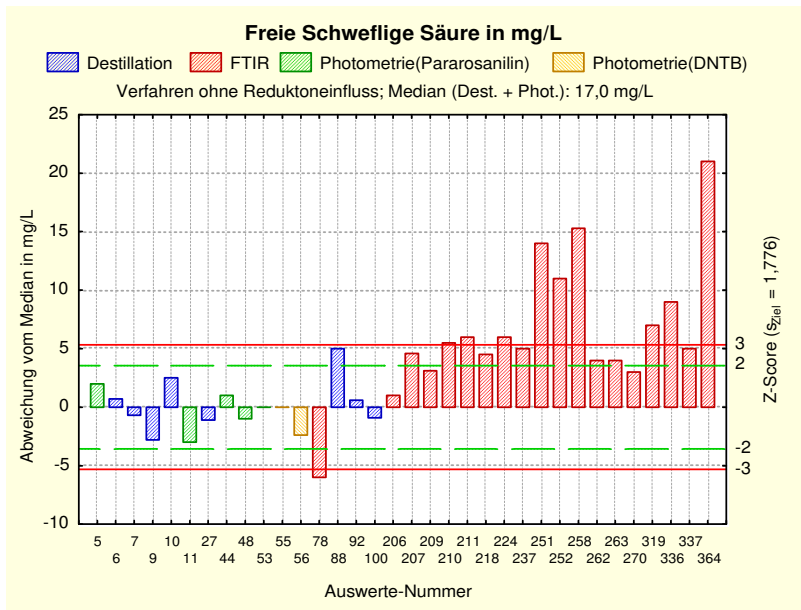
**5.16.4 Deskriptive Ergebnisse**

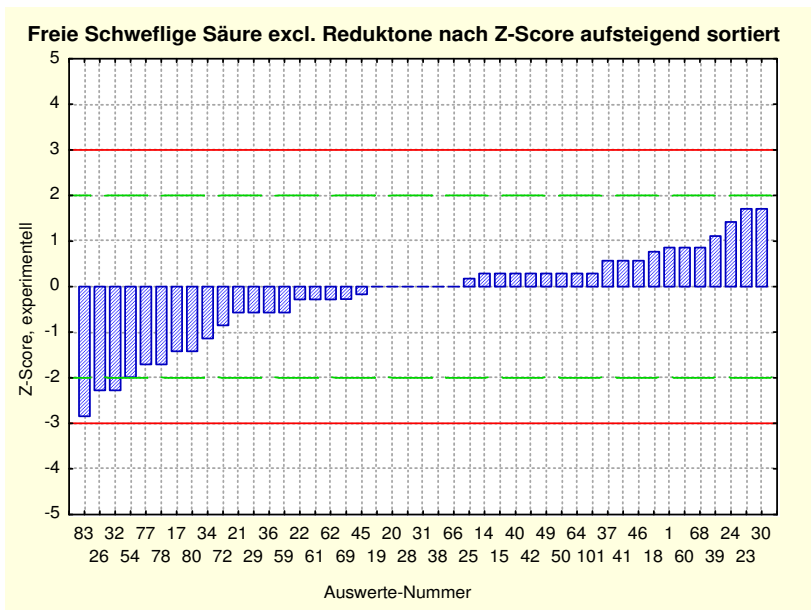
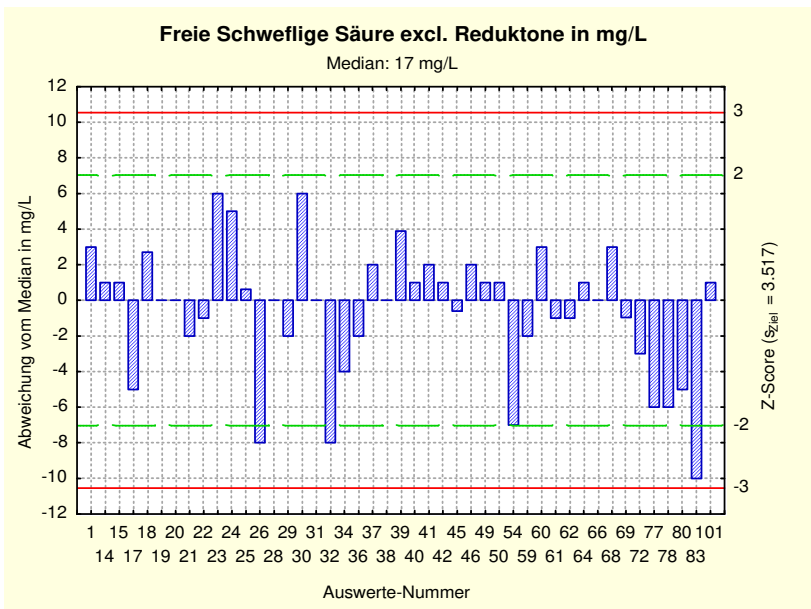
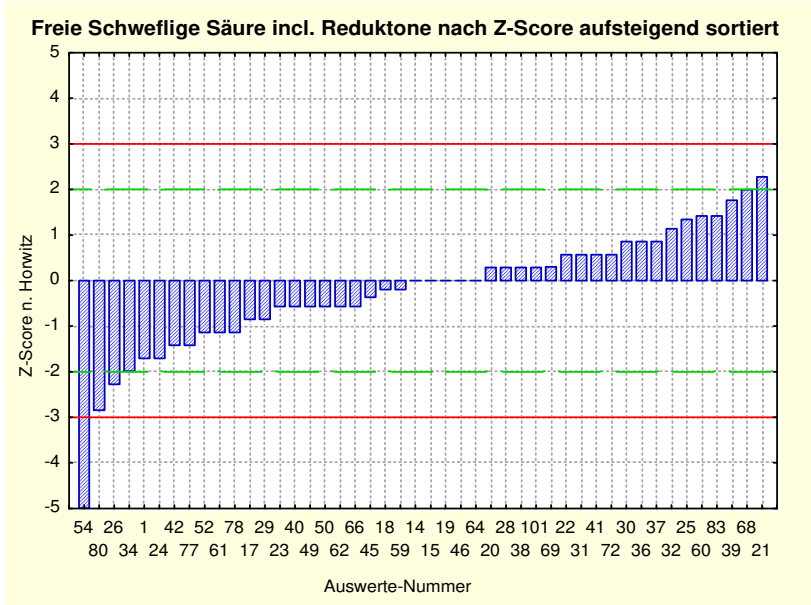
Ergebnisse für Freie Schweflige Säure [mg/L]	Destillation, Photometrie	Destillation, Photometrie + FTIR	Jodometrisch Reduktone		Hinweis
	alle Daten	alle Daten	inclusive alle Daten	exclusive ber. Daten	
Gültige Werte	15	30	46	45	45
Minimalwert	14,0	14,0	20,0	28,0	7,0
Mittelwert	17,00	19,62	37,22	37,61	16,39
Median	17,00	19,76	38,00	38,00	17,00
Maximalwert	22,0	28,0	46,0	46,0	23,0
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	2,126	3,491	4,741	4,013	3,676
Standardfehler des Mittelwertes	0,549	0,637	0,699	0,598	0,548
Zielstandardabweichung					
- nach Horwitz (s <sub>H</sub> )	1,776	2,018	3,517	3,517	1,776
- experimentell (s <sub>H</sub> incl. Red.)					3,517
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,20	1,73	1,35	1,14	2,07
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> incl. Red.)					1,05
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,31	0,32	0,20	0,17	0,31
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp</sub> herk.)					0,16

**5.16.5 Angaben zu den Analyseverfahren**

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 6.1(incl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B ohne Abzug der Reduktone	45	37,63	4,09
Redox incl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP inclusive Reduktone	1	34,00	
	jodometrische Verfahren ohne Abzug der Reduktone	46	37,50	4,19
LwK 6.1(excl.Red.)	Direkte jodometrische Titration OIV-MA-AS323-04B mit Abzug der Reduktone	44	16,75	3,28
Redox excl.	elektrometrische Bestimmung mit pH-Meter im mV-Modus und der Redoxelektrode ORP exclusive Reduktone	1	11,00	
	jodometrische Verfahren mit Abzug der Reduktone	45	16,59	3,49
LwK 6.2	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	8	17,21	2,19
LwK 6.3	Pararosanilnmethode	5	16,83	2,12
LwK 6.4	DNTB-Verfahren	2	15,80	1,92
	Destillations- und photometrische Verfahren	15	16,86	1,96
LwK 6.5	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	18	23,35	3,81
	Destillations-, photometrische und FTIR-Verfahren	33	20,24	4,38







## 5.17 Gesamte Schweflige Säure [mg/L]

### 5.17.1 Laborergebnisse (wie mitgeteilt)

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse aus Destillationsverfahren; verbindliche Bewertung

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
01	LwK 7.4.2	124,0	30,00	3,95	5,60	(**)
04	LwK 7.7	90,1	-3,90	-0,51	-0,73	
05	LwK 7.7	108,0	14,00	1,84	2,61	
06	LwK 7.3	98,0	4,00	0,53	0,75	
07	LwK 7.3	100,0	6,00	0,79	1,12	
08	LwK 7.4.2	92,0	-2,00	-0,26	-0,37	
09	LwK 7.3	93,5	-0,50	-0,07	-0,09	
10	LwK 7.3	93,1	-0,88	-0,12	-0,16	
11	LwK 7.4.2	96,0	2,00	0,26	0,37	
14	LwK 7.5.1(excl. Red.)	106,0	12,00	1,58	2,24	
15	LwK 7.5.1(incl. Red.)	92,0	-2,00	-0,26	-0,37	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	102,0	8,00	1,05	1,49	
18	LwK 7.5.1(excl. Red.)	95,6	1,60	0,21	0,30	
19	LwK 7.5.1(excl. Red.)	91,0	-3,00	-0,40	-0,56	
20	LwK 7.4.2	102,0	8,00	1,05	1,49	
21	LwK 7.5.1(incl. Red.)	144,0	50,00	6,59	9,33	(*)
22	LwK 7.4.2m	100,0	6,00	0,79	1,12	
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	16,00	2,11	2,99	
24	LwK 7.5.2(excl. Red.)	106,0	12,00	1,58	2,24	
25	LwK 7.4.2	100,0	6,00	0,79	1,12	
26	LwK 7.5.1(incl. Red.)	104,0	10,00	1,32	1,87	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	118,0	24,00	3,16	4,48	
29	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	16,00	2,11	2,99	
30	LwK 7.5.2(excl. Red.)	112,0	18,00	2,37	3,36	
31	LwK 7.4.1	93,0	-1,00	-0,13	-0,19	
32	LwK 7.5.2(incl. Red.)	110,0	16,00	2,11	2,99	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	112,0	18,00	2,37	3,36	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	136,0	42,00	5,53	7,84	(***)
37	LwK 7.4.1	96,0	2,00	0,26	0,37	
38	LwK 7.7	99,0	5,00	0,66	0,93	
39	LwK 7.4.2	91,0	-3,00	-0,40	-0,56	
40	LwK 7.4.1	93,0	-1,00	-0,13	-0,19	
41	LwK 7.4.1	94,0	0,00	0,00	0,00	
42	LwK 7.4.2	99,0	5,00	0,66	0,93	
44	LwK 7.4.2	94,0	0,00	0,00	0,00	
45	LwK 7.5.1(incl. Red.)	122,0	28,00	3,69	5,23	(***)
46	LwK 7.3	92,9	-1,10	-0,14	-0,21	
48	LwK 7.7	94,0	0,00	0,00	0,00	
49	LwK 7.4.2	99,0	5,00	0,66	0,93	
50	LwK 7.4.2	95,0	1,00	0,13	0,19	
52	LwK 7.5.2(incl. Red.)	103,0	9,00	1,19	1,68	
53	LwK 7.7	94,0	0,00	0,00	0,00	
54	LwK 7.4.2	98,0	4,00	0,53	0,75	
55	LwK 7.7	90,0	-4,00	-0,53	-0,75	
56	LwK 7.7	92,4	-1,60	-0,21	-0,30	
59	LwK 7.5.1(excl. Red.)	100,0	6,00	0,79	1,12	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	125,0	31,00	4,08	5,79	(***)
61	LwK 7.5.1(incl. Red.)	99,0	5,00	0,66	0,93	
62	LwK 7.5.1(incl. Red.)	103,0	9,00	1,19	1,68	
64	LwK 7.4.2	85,0	-9,00	-1,19	-1,68	
66	LwK 7.5.1(incl. Red.)	109,0	15,00	1,98	2,80	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	108,0	14,00	1,84	2,61	
69	LwK 7.5.1(incl. Red.)	123,1	29,14	3,84	5,44	(***)
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	89,0	-5,00	-0,66	-0,93	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	92	-2,00	-0,26	-0,37	
78	LwK 7.5.1(excl. Red.)	80	-14,00	-1,84	-2,61	
80	LwK 7.5.1(excl. Red.)	94,0	0,00	0,00	0,00	
83	LwK 7.5.1(incl. Red.)	127,0	33,00	4,35	6,16	(***)

(\*) Dieser Wert weicht um mehr als 50 % vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab.

(\*\*) Dieser Wert bleibt bei der wiederholten Berechnung unberücksichtigt.

(\*\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab.

**Fortsetzung: Laborergebnisse** (wie mitgeteilt)

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
86	LwK 7.1	88,8	-5,20	-0,69	-0,97	
87	LwK 7.3	98,7	4,70	0,62	0,88	
88	LwK 7.3	113,0	19,00	2,50	3,55	
89	LwK 7.4.2	98,3	4,28	0,56	0,80	
91	LwK 7.5.2(excl. Red.)	92,0	-2,00	-0,26	-0,37	
92	LwK 7.3	81,2	-12,80	-1,69	-2,39	
93	LwK 7.4.2	97,0	3,00	0,40	0,56	
94	LwK 7.5.1(incl. Red.)	134,0	40,00	5,27	7,47	(***)
95	LwK 7.4.1	90,0	-4,00	-0,53	-0,75	
97	LwK 7.7	93,2	-0,80	-0,11	-0,15	
99	LwK 7.4.1	93,0	-1,00	-0,13	-0,19	
100	LwK 7.3	93,9	-0,10	-0,01	-0,02	
101	LwK 7.4.2	88,0	-6,00	-0,79	-1,12	
206	LwK 7.8	90,0	-4,00	-0,53	-0,75	
207	LwK 7.8	90,1	-3,90	-0,51	-0,73	
208	FTIR(direkt)	93,0	-1,00	-0,13	-0,19	
209	LwK 7.8	101,3	7,30	0,96	1,36	
210	LwK 7.8	94,0	0,00	0,00	0,00	
211	LwK 7.8	103,0	9,00	1,19	1,68	
218	LwK 7.8	86,0	-8,00	-1,05	-1,49	
224	LwK 7.8	105,0	11,00	1,45	2,05	
237	LwK 7.8	88,0	-6,00	-0,79	-1,12	
251	LwK 7.8	96,0	2,00	0,26	0,37	
252	LwK 7.8	97,0	3,00	0,40	0,56	
258	LwK 7.8	92,0	-2,00	-0,26	-0,37	
262	LwK 7.8	65,0	-29,00	-3,82	-5,41	(***)
263	LwK 7.8	93,0	-1,00	-0,13	-0,19	
270	LwK 7.8	85,0	-9,00	-1,19	-1,68	
319	LwK 7.8	88,0	-6,00	-0,79	-1,12	
336	LwK 7.8	105,0	11,00	1,45	2,05	
337	LwK 7.8	89,0	-5,00	-0,66	-0,93	
364	LwK 7.8	86,0	-8,00	-1,05	-1,49	

(\*\*\*) Diese Werte weichen um mehr als 5 Z-Score-Einheiten vom Median der Werte aus Destillationsverfahren ab. Mittels Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie erhaltene Werte (LwK 7.8) wurden mit derselben Zielstandardabweichung bewertet wie die Ergebnisse herkömmlicher Methoden (Vergleichsstandardabweichung OIV-MA-323-04A).

**Anmerkung:** Ergebnisse jodometrischer Bestimmungen, die bei Anwesenheit von Ascorbinsäure einschließlich des Anteiles an Reduktionen mitgeteilt wurden, sind auch bei unauffälligem Z-.Score als fachlich fehlerhaft zu bewerten.

**5.17.2 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung einschließlich Reduktone; informativ

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
14	LwK 7.5.1(incl. Red.)	126,0	13,40	1,51	2,50	
15	LwK 7.5.1(incl. Red.)	92,0	-20,60	-2,33	-3,85	
17	LwK 7.5.1(incl. Red.)	102,0	-10,60	-1,20	-1,98	
18	LwK 7.5.1(incl. Red.)	113,2	0,60	0,07	0,11	
19	LwK 7.5.1(incl. Red.)	112,0	-0,60	-0,07	-0,11	
21	LwK 7.5.1(incl. Red.)	144,0	31,40	3,55	5,86	(**)
23	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	-2,60	-0,29	-0,49	
24	LwK 7.5.2(incl. Red.)	116,0	3,40	0,38	0,63	
26	LwK 7.5.1(incl. Red.)	104,0	-8,60	-0,97	-1,61	
28	LwK 7.5.1(incl. Red.)	118,0	5,40	0,61	1,01	
29	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	-2,60	-0,29	-0,49	
30	LwK 7.5.2(incl. Red.)	130,0	17,40	1,97	3,25	
32	LwK 7.5.2(incl. Red.)	110,0	-2,60	-0,29	-0,49	
34	LwK 7.5.1(incl. Red.)	112,0	-0,60	-0,07	-0,11	
36	LwK 7.5.1(incl. Red.)	136,0	23,40	2,64	4,37	
45	LwK 7.5.1(incl. Red.)	122,0	9,40	1,06	1,75	
52	LwK 7.5.2(incl. Red.)	103,0	-9,60	-1,08	-1,79	
59	LwK 7.5.1(incl. Red.)	122,3	9,70	1,10	1,81	
60	LwK 7.5.2(incl. Red.)	125,0	12,40	1,40	2,31	

Dieser Wert wurde bei der wiederholten Berechnung nicht berücksichtigt..

**Fortsetzung: Laborergebnisse: jodometrische Verfahren einschließlich Reduktone**

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
61	LwK 7.5.1(incl. Red.)	99,0	-13,60	-1,54	-2,54	
62	LwK 7.5.1(incl. Red.)	103,0	-9,60	-1,08	-1,79	
66	LwK 7.5.1(incl. Red.)	109,0	-3,60	-0,41	-0,67	
68	LwK 7.5.1(incl. Red.)	133,0	20,40	2,31	3,81	
69	LwK 7.5.1(incl. Red.)	123,1	10,54	1,19	1,97	
72	LwK 7.5.1(incl. Red.)	115,0	2,40	0,27	0,45	
77	LwK 7.5.1(incl. Red.)	114,0	1,40	0,16	0,26	
78	LwK 7.5.1(incl. Red.)	103,0	-9,60	-1,08	-1,79	
80	LwK 7.5.1(incl. Red.)	110,0	-2,60	-0,29	-0,49	
83	LwK 7.5.1(incl. Red.)	127,0	14,40	1,63	2,69	
91	LwK 7.5.2(incl. Red.)	112,0	-0,60	-0,07	-0,11	
94	LwK 7.5.1(incl. Red.)	134,0	21,40	2,42	3,99	

**5.17.3 Laborergebnisse: jodometrische Verfahren ausschließlich Reduktone**

Bewertungsbasis sind die Ergebnisse jodometrischer Bestimmung ausschließlich Reduktone; informativ

Auswerte-Nr.	Verfahren	Messwert	Abweichung	Z-Score Horwitz	Z-Score exper.	Hinweis
14	LwK 7.5.1(excl. Red.)	106,0	12,00	1,58	2,24	
15	LwK 7.5.1(excl. Red.)	72,0	-22,00	-2,90	-4,11	
17	LwK 7.5.1(excl. Red.)	79,0	-15,00	-1,98	-2,80	
18	LwK 7.5.1(excl. Red.)	95,6	1,60	0,21	0,30	
19	LwK 7.5.1(excl. Red.)	91,0	-3,00	-0,40	-0,56	
21	LwK 7.5.1(excl. Red.)	113,0	19,00	2,50	3,55	
23	LwK 7.5.1(excl. Red.)	97,0	3,00	0,40	0,56	
24	LwK 7.5.2(excl. Red.)	106,0	12,00	1,58	2,24	
26	LwK 7.5.1(excl. Red.)	83,0	-11,00	-1,45	-2,05	
28	LwK 7.5.1(excl. Red.)	96,0	2,00	0,26	0,37	
29	LwK 7.5.1(excl. Red.)	90,0	-4,00	-0,53	-0,75	
30	LwK 7.5.2(excl. Red.)	112,0	18,00	2,37	3,36	
32	LwK 7.5.2(excl. Red.)	77,0	-17,00	-2,24	-3,17	
34	LwK 7.5.1(excl. Red.)	94,0	0,00	0,00	0,00	
36	LwK 7.5.1(excl. Red.)	110,0	16,00	2,11	2,99	
45	LwK 7.5.1(excl. Red.)	101,7	7,70	1,01	1,44	
59	LwK 7.5.1(excl. Red.)	100,0	6,00	0,79	1,12	
60	LwK 7.5.2(excl. Red.)	102,0	8,00	1,05	1,49	
61	LwK 7.5.1(excl. Red.)	81,0	-13,00	-1,71	-2,43	
62	LwK 7.5.1(excl. Red.)	83,0	-11,00	-1,45	-2,05	
66	LwK 7.5.1(excl. Red.)	90,0	-4,00	-0,53	-0,75	
68	LwK 7.5.1(excl. Red.)	108,0	14,00	1,84	2,61	
69	LwK 7.5.1(excl. Red.)	100,1	6,12	0,81	1,14	
72	LwK 7.5.1(excl. Red.)	89,0	-5,00	-0,66	-0,93	
77	LwK 7.5.1(excl. Red.)	92,0	-2,00	-0,26	-0,37	
78	LwK 7.5.1(excl. Red.)	80,0	-14,00	-1,84	-2,61	
80	LwK 7.5.1(excl. Red.)	94,0	0,00	0,00	0,00	
83	LwK 7.5.1(excl. Red.)	91,0	-3,00	-0,40	-0,56	
91	LwK 7.5.2(excl. Red.)	92,0	-2,00	-0,26	-0,37	
94	LwK 7.5.1(excl. Red.)	111,8	17,83	2,35	3,33	

5.17.4 Deskriptive Ergebnisse

Ergebnisse für Gesamte Schweflige Säure [mg/L]	Destillationsverfahren		Jodometrisch; Reduktone inclusive exclusive		
	alle Daten	ber. Daten	alle Daten	ber. Daten	alle Daten
Gültige Werte	32	31	31	30	30
Minimalwert	81,2	81,2	92,0	92,0	72,0
Mittelwert	95,95	95,05	115,79	114,85	94,58
Median	94,50	94,00	113,20	112,60	94,00
Maximalwert	124,0	113,0	144,0	136,0	113,0
Standardabweichung (s <sub>L</sub> )	7,607	5,720	12,097	11,092	11,193
Standardfehler des Mittelwertes (u <sub>M</sub> )	1,345	1,027	2,173	2,025	2,044
Zielstandardabweichung					
n. Horwitz (s <sub>H</sub> )	7,625	7,590	8,889	8,849	7,590
experimentell (s <sub>exp herk.</sub> )	5,357	5,357	5,357	5,357	5,357
Horrat-Wert (s <sub>L</sub> /s <sub>H</sub> )	1,00	0,75	1,36	1,25	1,47
Quotient (s <sub>L</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	1,42	1,07	2,26	2,07	2,09
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>H</sub> )	0,18	0,14	0,24	0,23	0,27
Quotient (u <sub>M</sub> /s <sub>exp herk.</sub> )	0,25	0,19	0,41	0,38	0,38

5.17.5 Angaben zu den Analyseverfahren

Code	Verfahrensbeschreibung	Anzahl	Robustes Mittel	Robuste StdAbw.
LwK 7.1	Methode nach AVV V2	1	88,80	
LwK 7.3	Methode n. Paul bzw. OIV-MA-AS323-04A	9	95,73	5,68
LwK 7.4.1	Destillationsmethode n. Dr. Jakob	6	93,15	2,16
LwK 7.4.2	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein	15	96,10	5,44
LwK 7.4.2m	Destillationsmethode n. Dr. Rebelein, modifiziert	1	100,00	
	Destillationsverfahren	32	95,26	4,92
LwK 7.5.1 (incl. Red.)	jodometr. n. einf. Hydrolyse ohne Reduktionabzug	25	115,51	13,26
LwK 7.5.2 (incl. Red.)	jodometr. n. dopp. Hydrolyse ohne Reduktionabzug	6	116,00	11,32
	jodometrische Verfahren ohne Reduktionabzug	31	115,58	12,52
LwK 7.5.1 (excl. Red.)	jodometr. n. einf. Hydrolyse mit Reduktionabzug	25	94,08	11,54
LwK 7.5.2 (excl. Red.)	jodometr. n. doppelter Hydrolyse mit Reduktionabzug	5	98,35	14,39
	jodometrische Verfahren mit Reduktionabzug	30	94,68	12,33
LwK 7.7	DNTB-Verfahren	8	94,14	4,31
LwK 7.8	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der Gasphase	18	92,64	8,00
FTIR(direkt)	Fourier-Transform-Infrarotspektroskopie in der flüss. Phase	1	93,00	

